

# Theoretische und numerische Aspekte der Berechnung thermo-mechanischer Kriechvorgänge im Steinsalz

Stein, Erwin  
Wetjen, Diedrich  
Mahnken, Rolf  
Heemann, Ulrich

Veröffentlicht in:  
Abhandlungen der Braunschweigischen  
Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 39, 1987,  
S.61-121



Verlag Erich Goltze KG, Göttingen

# Theoretische und numerische Aspekte der Berechnung thermo-mechanischer Kriechvorgänge im Steinsalz

Von **Erwin Stein**,  
**Diedrich Wetjen, Rolf Mahnken und Ulrich Heemann**, Hannover

(Eingegangen am 20.10.1987)

## INHALT

### Bezeichnungen

1. Problemstellung
  2. Stoffgesetze für Steinsalz
    - 2.1 Überblick über Materialgesetze für Steinsalz
    - 2.2 Herleitung der thermo-mechanisch gekoppelten Stoffgleichungen des „Versetzungsmodells“
    - 2.3 Parameterstudien und Sensibilitätsanalysen
  3. Numerische Behandlung des thermo-mechanischen Kriechproblems
    - 3.1 Das instationäre Temperaturproblem
    - 3.2 Das mechanische Kriechproblem
  4. Kriechberechnung einer Modellkaverne
  5. Zusammenfassung
- Literatur

## Bezeichnungen

### Materialparameter

- Zeitverfestigungsgesetze
  - A Parameter (*Boresi/Deere, Lomenick/Bradshaw*)
  - B Parameter (*Thoms/Char*)
  - $b_1$  Spannungsexponent (*Thoms/Char*)
  - $b_2$  Temperaturexponent (*Thoms/Char*)
  - $b_3$  Zeitexponent (*Thoms/Char*)
  - l Temperaturexponent (*Lomenick/Bradshaw*)
  - m Zeitexponent (*Boresi/Deere, Lomenick/Bradshaw*)
  - n Spannungsexponent (*Boresi/Deere, Lomenick/Bradshaw*)
- Dehnungsverfestigungsgesetze
  - A bzw. K Parameter (*Menzel/Schreiner*)
  - $A_0, \mu_0$  Parameter zum Zeitpunkt  $t_0$  (*Menzel/Schreiner*)
  - $\beta$  bzw. n Spannungsexponent (*Menzel/Schreiner*)
  - $\Delta\Theta$  Temperaturdifferenz ( $\Theta - \Theta_0$ ) (*Menzel/Schreiner*)
  - $\mu$  bzw. m Dehnungsexponent (*Menzel/Schreiner*)

- $\Theta_0$  Bezugstemperatur (259 K, Raumtemperatur) (*Menzel/Schreiner*)  
 $\Theta_{\text{krit}}$  Kritische Temperatur (10 K) (*Menzel/Schreiner*)
- Strukturrheologische Stoffgesetze
  - $A_s, A_p$  Strukturfaktoren (sek. und prim.) (*Langer/Hunsche*)
  - $A_g, A_k$  Strukturfaktoren (Gleiten, Klettern) (*Carter/Heard*)
  - $A_1, A_2$  Strukturparameter (*Munson/Dawson*)
  - $B_1, B_2$  Strukturparameter (*Munson/Dawson*)
  - $D$  Strukturparameter (*Munson/Dawson*)
  - $m$  Abklingkonstante für prim. Kriechen (*Langer/Hunsche*)
  - $n$  Spannungsexponent (*Langer/Hunsche, Carter/Heard*)
  - $n_1, n_2$  Spannungsexponenten (*Munson/Dawson*)
  - $Q_s, Q_p$  Aktivierungsenergien (sek. und prim.) (*Langer/Hunsche*)
  - $Q_g, Q_k$  Aktivierungsenergien (Gleiten, Klettern) (*Carter/Heard*)
  - $Q_1, Q_2$  Aktivierungsenergien (*Munson/Dawson*)
  - $\sigma_{\text{eff}_0}$  Effektive Grenzspannung (*Munson/Dawson*)
  - Thermodynamisch konsistente Stoffgesetze
  - $k_0, k_1$  Parameter für  $\dot{\epsilon}^{\text{in}}$  im „Versetzungmodell“ (*Olschewski et al.*)
  - $k_2, k_3$  Parameter für  $\dot{\mu}$  im „Versetzungmodell“ (*Olschewski et al.*)
  - $\mu$  Innere Variable des „Versetzungmodells“ (*Olschewski et al.*)
  - $\mu_0$  Startwert für  $\mu$  im „Versetzungmodell“ (*Olschewski et al.*)
  - $\omega = k_0 k_2 - k_3$  Abklingkonstante im „Versetzungmodell“
  - $\zeta$  Parameter für Übergangskriechen im „Versetzungmodell“

### Allgemeines

- $\langle \dots \rangle$  Föppel-Symbol  $\langle a \rangle = \begin{cases} a, & \text{für } a > 0 \\ 0, & \text{für } a \leq 0 \end{cases}$
- $(\dots)$  Ableitung nach der Zeit  $\frac{\partial (\dots)}{\partial t}$

### Tensorielle Darstellung

- $\mathbf{b}$  Vektoren des Euklidischen Vektorraumes  $\mathbb{R}^3$  (Tensoren 1. Stufe)
- $\mathbf{B}$  Tensoren 2. Stufe
- $\mathbf{I}\mathbf{B}$  Tensoren 4. Stufe
- $\mathbf{1}$  Einheitstensor 2. Stufe
- $\mathbf{I}\mathbf{E}$  Einheitstensor 4. Stufe
- $\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}$  Dyadisches Produkt zweier Tensoren
- $\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}$  Skalarprodukt zweier Tensoren
- $\mathbf{B} \mathbf{C}$  Tensorprodukt zweier Tensoren 2. Stufe
- $\mathbf{I}\mathbf{B} \mathbf{C}$  Tensorprodukt eines Tensors 4. Stufe mit einem Tensor 2. Stufe

**Kontinuumsmechanische Begriffe**

- $(\dots)_x$  Auf  $\mathbf{X}$  bezogene Größen
- Div Divergenz bezogen auf  $\mathbf{X}$
- div Divergenz bezogen auf  $\mathbf{x}$
- Skalarwertige Größen
- $\alpha, \alpha_\Theta$  Temperatúrausdehnungskoeffizient
- $\alpha_r$  Faktor für die innere Reibspannung der Versetzungen
- $b$  Gitterkonstante des Kristalls (Burgersvektor)
- $C_p$  Spezifische Wärme
- $C_Q$  Wärmekapazität
- $d$  Mittlerer Abstand der Versetzungen
- $\Delta E$  Inkrement des Elastizitätsmodul pro K
- $e$  Die der inneren Variablen  $\mu$  zugeordnete Energiedichte
- $E$  Elastizitätsmodul
- $\eta$  Spezifische Entropie
- $F$  Faktor im verallgemeinerten Stoffgesetz Gl. (3.45)  $\triangleq \sigma_{\text{eff}}$
- $\phi$  Spezifische innere Energie
- $\Phi$  Spezifische freie Enthalpie
- $G$  Schubmodul
- $I_S, II_S$  1. bzw. 2. Invariante des 2. *Piola-Kirchhoff*-Spannungstensors
- $I_{T^D}, II_{T^D}$  1. bzw. 2. Invariante des *Cauchy*-Spannungsdeviators
- $I_T$  1. Invariante des *Cauchy*-Spannungstensors
- $J_2$  2. Invariante des Spannungsdeviators
- $K$  Kompressionsmodul
- $\kappa$  Funktion im verallgemeinerten Stoffgesetz Gl. (3.45)
- $\kappa_Q$  Konstante zur Bestimmung der Versetzungsmultiplikation
- $\lambda$  Wärmeleitfähigkeit
- $m$  Spannungsexponent im verallgemeinerten Stoffgesetz Gl. (3.45)
- $\mu$  innere Variable
- $\mu_0$  Anfangswert der inneren Variablen
- $\mu_1, \mu_2$  Ansatzkoeffizienten
- $\mu_\infty$  Stationärer Wert von  $\mu$
- $\nu$  Querkontraktionszahl
- $\psi$  Spezifische freie Energie
- $R$  Universelle Gaskonstante
- $r$  Äußere auf Fernwirkung beruhende Energiezufuhr
- $\varrho$  Versetzungsdichte
- $\varrho, \varrho_x$  Massendichte
- $\sigma_0$  Effektive Spannung im eindimensionalen Fall
- $\sigma_{\text{eff}}$  Effektive Spannung  $\sigma_{\text{eff}} = \sqrt{3 II_{T^D}}$
- $\sigma_r, \sigma_z$  Spannungskomponenten in radialer und vertikaler Richtung
- $\sigma_{\text{wirk}}$  Wirksame effektive Spannung  $\sigma_{\text{wirk}} = \sigma_{\text{eff}} - 2 \alpha_r b G \sqrt{\varrho}$

- $t$  Zeit
- $\Theta$  Temperatur
- $\Theta_x$  Bezugstemperatur
- $v$  Mittlere Geschwindigkeit der Versetzungen
- $\xi_\beta$  innerer Zustandsparameter
- Vektor- und tensorwertige Größen
- $\mathbb{C}$  Elastizitätstensor
- $\mathbf{E}$  *Green-Lagrange-Verzerrungstensor*
- $\mathbf{E}^{\text{el}}$  Tensor der elastischen Verzerrungen
- $\mathbf{E}^{\text{in}}$  Tensor der inelastischen Verzerrungen
- $\mathbf{E}^\Theta$  Tensor der Temperaturverzerrungen
- $\mathbf{F}$  Globaler Knotenkraftvektor
- $\mathbf{g}_x$  Temperaturgradient
- $\mathbf{h}_x$  Wärmeflußvektor
- $\chi_x$  Deformation  $\mathbf{x} = \chi_x(\mathbf{X}, t)$
- $\varepsilon_{ik}^{\text{el}}$  Komponenten des Tensors der elastischen Verzerrungen
- $\varepsilon_{ik}^{\text{in}}$  Komponenten des Tensors der inelastischen Verzerrungen
- $\mathbf{f}$  Körperkräfte
- $\mathbb{I}$  Materialtensor 4. Stufe
- $\mathbf{q}_\alpha$  innere Zustandvariable (tensor-, vektor- oder Skalarwertig)
- $\mathbf{S}$  2. *Piola-Kirchhoff-Spannungstensor*
- $\mathbf{s}$  Spannungsdeviator
- $\mathbf{T}$  *Cauchy-Spannungstensor*
- $\mathbf{T}^{\text{D}}$  Deviator des *Cauchy-Spannungstensors*
- $\mathbf{T}_x$  1. *Piola-Kirchhoff-Spannungstensor*
- $\mathbf{u}$  Verschiebungsvektor
- $\mathbf{X}$  Ortsvektor in der Bezugskonfiguration
- $\mathbf{x}$  Ortsvektor in der Momentankonfiguration
- Matrizen
- $\mathbf{1}$   $[1, 1, 1, 0, 0, 0]^T$
- $\mathbf{B}$  Verzerrungs-Verschiebungsmatrix
- $\mathbf{C}$  Elastizitätsmatrix (Spannungsberechnung)
- $\mathbf{C}$  Kapazitätsmatrix (Temperaturfeldberechnung)
- $\mathbf{D}_s$  Projektionsmatrix  $\mathbf{D}_s = \mathbf{I} - \frac{1}{3}\mathbf{1}\mathbf{1}^T$
- $\mathbf{D}$  Ableitungsmatrix
- $\mathbf{E}$  Verzerrungsvektor
- $\boldsymbol{\varepsilon}$  Gesamtverzerrungsvektor
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}$  Vektor der elastischen Verzerrungen
- $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}}$  Vektor der inelastischen Verzerrungen
- $\boldsymbol{\varepsilon}^\Theta$  Vektor der Temperaturverzerrungen
- $\mathbf{F}$  Deformationsgradient
- $\mathbf{\Gamma}$  Matrix im Stoffgesetz für  $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{in}}$

- H** Ableitung der Geschwindigkeit der inelastischen Verzerrung nach der Spannung  $\sigma$
- H<sup>(j)</sup>** Iterationsmatrix für globale Iteration
- H<sup>(k)</sup>** Iterationsmatrix für lokale Iteration
- h** Wärmeflußvektor
- h<sub>n</sub>** Wärmeflußvektor in Richtung der Flächennormalen
- $\bar{h}_n$**  Vorgeschriebener Wärmeflußvektor
- I** Einheitsmatrix
- K** Konduktivitätsmatrix (Temperaturberechnung)
- $\Lambda$**  Wärmeleitfähigkeitsmatrix
- n** Normalenvektor
- Q** Lastvektor aus Wärmequellen
- Q<sub>k</sub>** Vektor der Knotenwerte der Wärmequellen
- K<sub>T</sub>** Konsistente Tangentialmatrix
- $\psi$**  Globales Residuum
- r** Lokales Residuum
- $\sigma$**  Spannungsvektor
- s** Spannungsdeviator
- T** Spannungsvektor
- $\Theta$**  Vektor für das Temperaturfeld
- $\Theta_k$**  Knotentemperaturvektor
- $\omega$**  Vektor der Ansatzfunktionen (Temperaturfeldberechnung)
- U** Globaler Verschiebungsvektor

### Bezeichnungen für die numerische Berechnung

- $\Delta(\dots)$  Inkrementelle Größe
- $\Delta\Delta(\dots)$  Inkrementelle Größe für Subinkremente
  - i Zähler für die Zeitschritte
  - j Zähler für die Subzeitschritte
- (j) Zähler für den Iterationsschritt in der globalen Iteration
- (k) Zähler für den Iterationsschritt in der lokalen Iteration
- h Zeitinkrement
- n Ordnung eines Zeitintegrationsverfahrens
- $\Omega$  Gebiet im  $\mathbb{R}^3$

## 1. Problemstellung

Bis vor wenigen Jahrzehnten dienten die Salzstöcke, die in Deutschland in der nord-deutschen Tiefebene zu finden sind, ausschließlich der Salzgewinnung. In neuerer Zeit werden ausgesolte Kavernen für die Lagerung von Primärenergieträgern wie Erdgas und Erdöl und als Druckluftspeicher genutzt. Steinsalz ist ein sehr bildsames Material, das i. a. kein sprödes, sondern ein plastisches Verhalten zeigt. Es ist daher für die Endlagerung radioaktiver und anderer umweltgefährdender Stoffe in den Mittelpunkt des

Interesses gerückt. [Zu Endlagerkonzepten allgemein siehe z.B. *Milnes et al.* (1980) und *Kreusch/Hirsch* (1984); zur Endlagerung im Salz siehe u. a. *Albrecht* (1980), *Hofrichter* (1980), *Grimmel* (1980) und die Erwiderung von *Jaritz et al.* (1980)]. Die für die Salzgewinnung angelegten unterirdischen Hohlräume wurden bisher ausschließlich nach bergmännischen Erfahrungswerten dimensioniert und gebaut. Da chemische und radioaktive Abfälle ein hohes Gefahrenpotential besitzen, reichen diese Erfahrungen für die Dimensionierung eines Endlagerbergwerkes allein nicht mehr aus, vielmehr ist hier ein rechnerischer Standsicherheitsnachweis zu führen, wie es für andere Bauwerke üblich und vorgeschrieben ist. Zur Stabilität von Deponiekavernen siehe *Langer et al.* (1984). Bei der Endlagerung radioaktiver Substanzen, die sehr lange Halbwertszeiten besitzen (z.B. hat Plutonium-239 eine Halbwertszeit von  $T_{1/2} \approx 24\,000$  Jahre), muß sichergestellt werden, daß diese Stoffe solange nicht mit der Biosphäre in Berührung kommen können, bis ihre Radioaktivität auf ein erträgliches Maß zurückgegangen ist. Zur Problematik radioaktiver Abfälle allgemein und im Hinblick auf die Endlagerung sei besonders auf *Herrmann* (1983) hingewiesen. Bei chemischen Stoffen, deren Toxizität nicht im Laufe der Zeit abnimmt, muß der Abschluß von der Biosphäre praktisch unbegrenzt sichergestellt werden. Aus diesen Gründen sind an ein Endlagerbauwerk hohe Sicherheitsanforderungen zu stellen [siehe z.B. *Langer/Venzlaff* (1984)]. Zur Sicherstellung dieser Anforderungen reicht es z.B. nach *Langer* (1980) nicht aus, die Standsicherheit des Untertagebauwerkes allein nachzuweisen, vielmehr muß außerdem die Integrität des Salzstockes als Ganzes für große Zeiträume [*Grimmel* (1980) spricht hier von bis zu  $10^7$  Jahren – eine verglichen mit der Lebenserwartung des Menschen unvorstellbare Zeitspanne] gewährleistet sein.

Um die geforderte Schadensfreiheit eines Salzstockes rechnerisch nachweisbar zu machen, bedarf es eines Materialgesetzes, das eine Extrapolation der im Labor oder durch in-situ-Messungen aus nur wenige Monate oder Jahre dauernden Versuchen gewonnene Ergebnisse auf Zeiträume der vorher genannten Größe erlaubt. Der bisher und auch heute noch häufig beschrittene Weg, mit rein phänomenologischen Ansätzen wie z.B. Zeitverfestigungsgesetzen (siehe Kap. 2.1.1), Dehnungsverfestigungsgesetzen (siehe Kap. 2.1.2) und modellrheologischen Gesetzen (siehe Kap. 2.1.3), die die mikrophysikalischen Deformationsmechanismen völlig außer acht lassen, und deren Parameter durch reines „curve-fitting“ bestimmt werden, zu arbeiten, kann nicht der richtige Weg sein, wenn die erforderlichen zeitlichen Extrapolationen vertrauenswürdig sein sollen. Halbempirische Ansätze wie das strukturrheologische Kriechgesetz von *Langer/Hunsche* (siehe Kap. 2.1.3), die auf den Deformationsmechanismen des Kristallgitters beruhen, stellen einen weitaus besseren Weg dar. Die Extrapolationsfähigkeit über große Zeiträume kann aber nur durch ein thermodynamisch konsistentes Stoffgesetz gewährleistet werden. Ein Schritt in diese Richtung wurde in unserem Forschungsvorhaben mit der Entwicklung konsistenter Materialgleichungen für Steinsalz in Form eines gekoppelten Differentialgleichungssystems, das der zeitlichen Entwicklung einer inneren Variablen, die mit der Änderung der Kristallstruktur während der Deformation verknüpft ist, Rechnung trägt. Dieses Materialgesetz, das wir als „Versetzungsmodell“ bezeichnen, wird in Kap. 2.2 ausführlich vorgestellt und in den wei-

teren Kapiteln für Parameterstudien, Sensibilitätsanalysen und Finite-Element-Rechnungen benutzt.

Ein Grubenbauwerk oder eine Kaverne im Salzgestein stellt ein sehr komplexes Bauwerk dar, dessen rechnerischer Nachweis nur noch numerisch erfolgen kann. Diese Komplexität stellt hohe Ansprüche an die Algorithmen eines Computerprogrammes. In Anbetracht der langen Zeiträume, für die diese Rechnungen durchgeführt werden müssen, ist einerseits der numerische Fehler möglichst gering zu halten und andererseits auf einen schnellen Algorithmus Wert zu legen.

Die numerische Lösung des thermo-mechanischen Kriechproblems geht von der inkrementellen Entkopplung des Gesamtproblems aus. Dies geschieht durch eine im Inkrement separate Berechnung von Temperaturfeldausbreitung und mechanischem Kriechprozeß. Für beide Problemkreise wird hierbei die Lösung von partiellen Differentialgleichungen mit Rand- und Anfangsbedingungen erforderlich. Durch die räumliche Diskretisierung im Rahmen einer Finite-Element-Methode werden diese Differentialgleichungssysteme auf gewöhnliche Differentialgleichungen mit Anfangsbedingungen reduziert, wofür geeignete Differenzenverfahren zur Zeitintegration zu wählen sind. Nach jedem Zeitinkrement sind die Parameter und sonstigen Daten anzupassen.

Zur Lösung der Zeitintegration stehen explizite und implizite Verfahren zur Verfügung. Bei Auftreten hoher Temperaturen (z.B. 100–300°C) und hoher Spannungen (50–100 MPa) ist der Grad der Nichtlinearität der zu lösenden Differentialgleichungen sehr hoch, so daß die Differenzenverfahren unbedingt unter dem Aspekt von Stabilitäts- und Genauigkeitskriterien angewendet werden müssen. Bei Anwendung impliziter Verfahren werden zur Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme, insbesondere bei vielen Unbekannten, effektive Algorithmen erforderlich.

## 2. Stoffgesetze für Steinsalz

Das in der Natur vorkommende Steinsalz ist polykristallin und reagiert schon bei normaler Raumtemperatur auf thermo-mechanische Beanspruchungen ähnlich wie metallische Werkstoffe bei hohen Temperaturen (z.B. Stahl bei  $\approx 500^\circ\text{C}$ ). Es hat das Bestreben, sich einer zeitlich konstanten Belastung im Verlaufe der Zeit zu entziehen, d.h. Spannungsspitzen durch Umlagerung abzubauen. Diesen zeitabhängigen Deformationsprozeß nennt man Kriechen. Er ist in den Gitterfehlern der Kristalle, vornehmlich den Versetzungen, begründet. Beim Kriechprozeß unterscheidet man drei Phasen.

### 1. Das **primäre Kriechen** oder **Übergangskriechen**:

In dieser Phase findet in den Kristallen eine ständige Vermehrung der Versetzungen statt. Da die Versetzungen sich gegenseitig durchdringen (forest dislocations) oder passieren müssen, führt dies zu einer stark zunehmenden Verfestigung bzw. stark abnehmenden Kriechrate.

### 2. Das **sekundäre Kriechen** oder **stationäre Kriechen**:

Die Versetzungen haben die Möglichkeit, sich gegenseitig zu durchdringen, ihre wechselseitigen Spannungsfelder zu passieren bzw. Hindernisse durch Quergleiten oder Kletterbewegung (Punktdefektdiffusion) zu umgehen, oder sich gegenseitig



durch sogenannte Dipolanihilation zu vernichten. Dies führt zu einer Entfestigung des Materials. In der sekundären Kriechphase halten sich Verfestigungs- und Entfestigungsmechanismen die Waage. Hierdurch entsteht ein stationäres Flußgleichgewicht bzw. stationäres Kriechen.

### 3. Das **tertiäre Kriechen** oder **beschleunigte Kriechen**:

Dieses Stadium ist durch eine schnell anwachsende Kriechrate gekennzeichnet. Durch die Bildung von Mikrorissen kommt es zu einer Auflockerung im Gefüge. Diese Mikrorisse, die sich vornehmlich an Kreuzungspunkten von Gleitbändern oder an Korngrenzen bilden, können sich zu größeren Rissen ausbilden und so zum Bruch führen.

Das tertiäre Kriechen und die Entstehung von Rissen sowie der Kriechbruch selbst ist noch wenig erforscht, besonders unter Druckbelastungen. Die meisten Erkenntnisse auf dem Gebiet der Bruchmechanik besitzt man bis heute nur in der Beurteilung des Rißfortschrittes eines oder weniger Risse unter Zug- oder Schubbelastung, in erster Linie bei elastischen Werkstoffen mit sprödem Bruchverhalten. Z. Zt. wird an unserem Institut und einigen anderen Instituten versucht, auch für das tertiäre Kriechen ein Stoffgesetz zu entwickeln. Da die Experimente zur Erforschung der Rißentstehung und die darauf beruhenden mechanisch-mathematischen Modelle noch nicht abgeschlossen sind, sollen im folgenden nur Stoffgesetze zur Beschreibung des primären und sekundären Kriechens betrachtet werden.

Die zur Zeit bekannten und verwendeten Stoffgesetze für Steinsalz lassen sich grob in drei Gruppen unterteilen:

- (1) **empirische** Stoffgesetze,
- (2) **halbempirische** Stoffgesetze und
- (3) **thermodynamisch konsistente** Stoffgesetze.

In die Gruppe der **empirischen Stoffgesetze** sind die Gesetze einzuordnen, die von einer fortwährenden Verfestigung ausgehen und daher nur das Primär-Kriechen beschreiben können. Zu ihnen gehören

- (1.1) die *Zeitverfestigungsgesetze* und
- (1.2) die *Dehnungsverfestigungsgesetze*.

Ferner werden hier

- (1.3) die *modellrheologischen* Stoffgesetze

erfaßt, die bisher weite Verbreitung fanden, aber nur in einer nichtlinearen, d. h. spannungs- und temperaturabhängigen, Form brauchbar sind. In diesen Stoffgesetzen werden die physikalischen Vorgänge während des Primär- und des Sekundärkriechens durch das Zusammenwirken von Federn, Dämpfern und Reibelementen, sogenannten rheologischen Modellkörpern, zunächst eindimensional simuliert und ggf. mit Hilfe von Invarianten zwei- und dreidimensional verallgemeinert.

Zu den **halbempirischen** Gesetzen zählen vor allem

- (2.1) die *struktur-rheologischen* Stoffgesetze,

bei denen zur Beschreibung der verschiedenen physikalisch wirksamen Deformationsmechanismen empirische Ansätze gewählt werden.

Die Herleitung **thermodynamisch konsistenter** Stoffgesetze erfolgt im Rahmen der Kontinuumsmechanik unter strikter Beachtung der Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drehimpuls und Energie (1. Hauptsatz der Thermodynamik) sowie des Dissipationspostulates (2. Hauptsatz der Thermodynamik) z.B. in der Form der *Clausius-Duhem*-Ungleichung. Neben diesen stoffunabhängigen Gleichungen müssen noch konstitutive Annahmen eingeführt werden [siehe z.B. *Olschewski et al.* (1981)].

Die diesen Stoffgleichungen zugrunde liegenden thermodynamischen Theorien sind z.B.

(3.1) die Theorie der Stoffe mit Gedächtnis und

(3.2) die Theorie der inneren Variablen.

Ausführlichere Darstellungen dieser Stoffgesetze für Steinsalz sind u.a. in Veröffentlichungen von *Lux/Rokahr* (1980) und *Olschewski, Stein, Wagner, Wetjen* (1981) zu finden. Außerdem sei auch auf die Veröffentlichung von *Lux* (1983) hingewiesen, in der er u.a. eine detaillierte Übersicht über Stoffgesetze für Steinsalz gibt.

## 2.1 Überblick über Materialgesetze für Steinsalz

### 2.1.1 Zeitverfestigungsgesetze

Bei diesen Stoffgesetzen wird angenommen, daß im Laufe der Zeit eine Verfestigung des Salzes eintritt, die direkt von der Zeit, der Spannung und ggf. der Temperatur abhängt, nicht aber von den Verzerrungen. Hier sind u.a. zu nennen:

Stoffgesetz nach *Boresi/Deere* (1963)<sup>1)</sup>

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{in}(t) = \frac{3}{2} m A \sigma_{eff}^{n-1} t^{m-1} s_{ik}, \quad (2.1)$$

Stoffgesetz nach *Lomenick/Bradshaw* (1969)

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{in}(t) = \frac{3}{2} m A \sigma_{eff}^{n-1} \Theta^{\phi} t^{m-1} s_{ik}, \quad (2.2)$$

Stoffgesetz nach *Thoms/Char/Bergeron* (1972)

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{ik}^{in}(t) &= \frac{3}{2} B J_2^{b_1} \Theta^{b_2} t^{-b_3} s_{ik} \\ &= \frac{3}{2} B \left( \frac{\epsilon_{eff}^2}{3} \right)^{b_1} \Theta^{b_2} t^{-b_3} s_{ik}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

*Lomenick* und *Bradshaw* verwenden das Stoffgesetz von *Boresi/Deere*, berücksichtigen aber die Temperaturabhängigkeit des Kriechprozesses explizit durch einen Potenz-

<sup>1)</sup> Die Liste der Bezeichnungen befindet sich am Anfang dieser Arbeit.

ansatz. Dieses Stoffgesetz wird von *Thoms/Char/Bergeron* in modifizierter Form zur FE-Berechnung von Pfeilernmodellen herangezogen.

### 2.1.2 Dehnungsverfestigungsgesetze

Im Gegensatz zu den Stoffgesetzen mit Zeitverfestigung geht man bei den Dehnungsverfestigungsgesetzen davon aus, daß die Verfestigung des Salzes von den Kriechverzerrungen, dem Spannungszustand und ggf. der Temperatur, aber nicht explizit von der verstrichenen Zeit abhängt. Von diesen Kriechgesetzen soll nur eines vorgestellt werden, das

Stoffgesetz nach *Menzel/Schreiner* (1975–1978)

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{in}(\epsilon_{eff}^{in}) = \frac{3}{2} A_0 \sigma_{eff}^{\beta-1} \epsilon_{eff}^{in - \mu_0} s_{ik} \quad (2.4)$$

bzw. in seiner temperaturabhängigen Form

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{in}(\epsilon_{eff}^{in}) = \frac{3}{2} A_0 e^{\frac{\Theta - \Theta_0}{\Theta_{krit}} - \frac{\Theta}{\Theta_0}} \epsilon_{eff}^{\beta-1} \epsilon_{eff}^{in - \mu_0 \frac{\Theta_0}{\Theta}} s_{ik}. \quad (2.5)$$

Es sei angemerkt, daß alle diese Zeit- und Dehnungsverfestigungsgesetze ein stationäres Kriechen infolge der permanenten Materialverfestigung nicht beschreiben können.

### 2.1.3 Modellrheologische Stoffgesetze

In dieser Gruppe sind lineare Modelle wie

der *Burgers-Körper* (1935),  
Stoffgesetze von *Serata* (1968) und  
*Langer/Hofrichter* (1969) sowie der  
erweiterte *Schofield-Scottblair-Körper* nach *Langer* (1978)

ebenso zu nennen wie nichtlineare rheologische Modelle, die u. a. von

*Olschewski et al.* (1981),  
*Nipp* (1982),  
*Heusermann* (1982) und  
*Lux* (1983) beschrieben werden.

Lineare rheologische Modelle können das stark spannungs- und temperaturabhängige Deformationsverhalten von Steinsalz nur sehr eingeschränkt erfassen und sind daher kaum als geeignet anzusehen.

Nichtlineare rheologische Modelle dagegen sind in der Lage, spannungs- und temperaturabhängiges Verhalten nachzuvollziehen. Umfangreiche Studien zu einem nichtlinearen rheologischen Stoffgesetz sind z.B. von *Heusermann* (1982) veröffentlicht worden. Innerhalb dieser Arbeit soll deshalb auf die modellrheologischen Materialgesetze nicht näher eingegangen werden.

### 2.1.4 Strukturrheologische Stoffgesetze

Die strukturrheologischen Stoffgesetze sind unter den empirischen und halbempirischen Stoffgleichungen wohl am geeignetsten, das komplexe Kriechverhalten von Steinsalz wirklichkeitsnah zu beschreiben, da sie direkt von den physikalisch wirksamen Deformationsmechanismen ausgehen. Die Ansätze für diese Stoffgesetze sind aus der Hochtemperatur-Metallphysik übernommen. Sie unterscheiden i. a. vor allem zwei Verformungsmechanismen, die das stationäre Kriechen beeinflussen:

das **Versetzungsklettern** bei niedrigen Spannungen und erhöhten Temperaturen (größer als 40% der Schmelztemperatur) und

das **Versetzungsgleiten** bei hohen Spannungen und niedrigen Temperaturen (unter 40% der Schmelztemperatur).

Das Übergangskriechverhalten wird durch die meisten Gesetze nicht oder nur empirisch erfaßt.

Zu den strukturrheologischen Gesetzen zählen

das Stoffgesetz nach *Carter/Heard* (1970)

für das Versetzungsgleiten

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{in} = \frac{3}{2} A_g e^{-\frac{Q_g}{R\Theta}} \sinh(\sigma_{eff}) \sigma_{eff}^{-1} s_{ik}, \quad (2.6)$$

für das Versetzungsklettern

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{in} = \frac{3}{2} A_k e^{-\frac{Q_k}{R\Theta}} \sigma_{eff}^{n-1} s_{ik}, \quad (2.7)$$

das Stoffgesetz nach *Langer/Hunsche* (1980)

für Versetzungsklettern und Übergangskriechen

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{in} = \frac{3}{2} \left[ A_p m e^{-mt} e^{-\frac{Q_p}{R\Theta}} + A_s e^{-\frac{Q_s}{R\Theta}} \right] \sigma_{eff}^{n-1} s_{ik} \quad (2.8)$$

und das Stoffgesetz nach *Munson/Dawson* (1981)

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{ik}^{in} = \frac{3}{2} \left\{ A_1 e^{-\frac{Q_1}{R\Theta}} \left( \frac{\sigma_{eff}}{G} \right)^{n_1} + A_2 e^{-\frac{Q_2}{R\Theta}} \left( \frac{\sigma_{eff}}{G} \right)^{n_2} + \right. \\ \left. + 2 \left[ B_1 e^{-\frac{Q_1}{R\Theta}} + B_2 e^{-\frac{Q_2}{R\Theta}} \right] \sinh \left( D \left\langle \frac{\sigma_{eff} - \sigma_{eff_0}}{G} \right\rangle \right) \right\} \sigma_{eff}^{-1} s_{ik}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

*Munson* und *Dawson* beschreiben mit dem ersten Term das Versetzungsklettern und mit dem letzten Term das Versetzungsgleiten, das erst von einer Schwellspannung  $\sigma_{eff_0}$  an wirksam wird, außerdem machen sie einen Ansatz für einen undefinierten Mechanismus im Bereich niedriger Spannungen und niedriger Temperaturen, der aber dem

gleichen mathematischen Modell folgt wie das Versetzungsklettern. Das Übergangskriechen wird mit dem Ansatz nicht erfaßt. Der Ansatz für das Versetzungsklettern entspricht dem bei *Carter/Heard* und *Langer/Hunsche*, derjenige für das Versetzungsgleiten im Prinzip dem von *Carter/Heard*, wenn  $\sigma_{\text{eff}}$  durch  $\sigma_{\text{eff}} - \sigma_{\text{eff}_0}$  ersetzt wird. Nach Aussagen von *Dr. Munson* entspricht die Beschreibung des undefinierten Mechanismus weitgehend empirischen Ergebnissen und wurde aufgrund nicht hinreichenden Probenmaterials angegeben. Zur Erfassung der Primärkriechphase wurde ein einfacher empirischer Ansatz verwendet. Dieses Gesetz wurde auch von *Wallner* (1981) für die thermomechanische Berechnung von Salzstrukturen verwandt. Nach *Wawersik/Zeuch* (1984) sind die Bereiche des bisher dem Versetzungsklettern und einem unbekannten Mechanismus (*Munson/Dawson*) zugerechneten Kriechens tatsächlich weitgehend durch Quergleiten bestimmt. Dies hat jedoch keinen Einfluß auf den gewählten Ansatz.

Von den hier vorgestellten strukturrheologischen Stoffgesetzen wird das Gesetz von *Langer/Hunsche* im folgenden weiter untersucht, da es bei einer überschaubaren Anzahl von Materialparametern sowohl eine Beschreibung des Übergangskriechens als auch des für das stationäre Kriechen entscheidenden Mechanismus des Versetzungskletterns enthält.

### 2.1.5 Thermodynamisch konsistente Stoffgesetze

Als thermodynamisch konsistent sind grundsätzlich alle Stoffgesetze anzusehen, die den Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik und dem Dissipationspostulat genügen. So haben *Olschewski, Stein, Wagner, Wetjen* (1981) z.B. eine thermodynamisch konsistente Form des modellrheologischen Stoffgesetzes von *Langer* angegeben. Für das wirkliche Verhalten von Steinsalz angemessener ist es aber, wenn bei der Konstruktion thermodynamisch konsistenter Stoffgesetze Theorien verwendet werden, die auf die Deformationsmechanismen Bezug nehmen. Diese Theorien liegen z.B. in Form der oben genannten Theorie der Stoffe mit Gedächtnis und der Theorie der inneren Variablen vor.

Auf der Theorie der inneren Variablen basieren drei Stoffgesetze, die von *Olschewski et al.* vorgeschlagen worden sind.

Das „**Versetzungsmodell**“ lautet in entkoppelter Form

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{\text{in}} = \frac{3}{2} k_1 \left\{ k_0 e^{-\omega t} \left( \frac{k_2}{\omega} - \frac{\zeta}{k_0} \right) - \frac{k_3}{\omega} \right\} \sigma_{\text{eff}}^n s_{ik}. \quad (2.10)$$

In diesem Modell wird die Deformationsgeschichte durch eine skalare Größe, die als Funktion der Versetzungsdichte zu deuten ist, berücksichtigt. Zur Zeit lassen sich für den allgemeinen dreidimensionalen Fall noch nicht alle Parameter aus den vorliegenden, meist einachsigen Versuchen eindeutig bestimmen. Zur Bestimmung der Parameter  $k_2$  und  $k_3$  [vergleiche Gl. (2.23)] sind Versuche notwendig, die die Änderung des Versetzungszustandes erfassen. Dazu könnten z.B. Versuche, wie z.B. der Torsionsversuch an der Zylinderprobe, durchgeführt werden, die nichthomogene Spannungs-

zustände erzeugen [siehe Kröner (1973)]. Solange Ergebnisse aus solchen Versuchen nicht vorliegen, können die Parameter nur durch Vergleich mit anderen Stoffgesetzen gewonnen werden.

Das **Modell der inneren Barrieren** (in eindimensionaler Form) hat die in der Physik wohlbekannte Form

$$\dot{\epsilon}^{\text{in}} = A \left( \frac{\sigma}{G} \right)^n e^{-\frac{Q}{R\Theta}} \langle \sigma - \sigma_i \rangle. \quad (2.11)$$

Dieses Modell unterscheidet sich vom „Versetzungsmodell“ durch die Beschreibung der inneren Struktur mittels einer tensoriellen inneren Variablen, dem Tensor der „inneren Spannungen“  $\sigma_i$ . Der Potenzanteil ist das *Nortonsche* Gesetz für Kriechen, während das *Arrhenius'sche* Exponentialgesetz thermisch aktivierte Deformationen beschreibt.

#### Das **inelastische Verzerrungsmodell**.

Hier werden die einzelnen inelastischen Verzerrungsanteile als tensorielle innere Variable eingeführt. Dieses Gesetz ist aber auf kleine Deformationen beschränkt, da die Gesamtverzerrungen sich additiv aus einem thermoelastischen und verschiedenen reversiblen und irreversiblen Anteilen zusammensetzen.

In die Gruppe der thermodynamischen konsistenten Stoffgesetze gehören ebenso die

#### **Endochrone Theorie der Viskoplastizität** von Valanis (1975)

und die

#### **Gesamtdehnungstheorie** von Krempl (1975/1980),

die in dem Bericht von Olschewski *et al.* (1981) ausführlich besprochen sind.

Weiterhin kann man ein

Stoffgesetz von Fossum (1977)

$$\dot{\epsilon}_{ik}^{\text{in}} = \frac{3}{2} A_0 \left[ \sigma_{\text{eff}} - A_1 \left( \epsilon_{\text{eff}}^{\text{in}} \right)^n \right]^m \sigma_{\text{eff}}^{-1} S_{ik} \quad (2.12)$$

in diese Gruppe einreihen, da es auf der Grundlage einer irreversiblen Thermodynamik entwickelt wurde.

Heusermann (1982), der es zu den halbempirischen Stoffgesetzen rechnet, weist darauf hin, daß die Bestimmung der Parameter schwierig und fehleranfällig sei.

## **2.2 Herleitung der thermo-mechanisch gekoppelten Stoffgleichungen des „Versetzungsmodells“**

Zur Berechnung eines thermo-mechanischen Systems ist i. a. ein Anfangs-Randwertproblem zu lösen. Die Kontinuumsmechanik stellt hierfür Bilanzgleichungen bereit, die vom Material unabhängig sind. Diese reichen aber zur Lösung des Problems nicht aus, so daß weiter übergreifende und materialabhängige konstitutive Annahmen

nötig sind. Die Materialgleichungen stellen einen Zusammenhang zwischen den im Kontinuum wirkenden Spannungen, der Temperatur und der Bewegung der Punkte eines Kontinuums her. Konstitutive Gleichungen sind mathematische Beschreibungen der Materialeigenschaften. Diese Gleichungen sollen in der Lage sein, einen experimentellen Befund so genau wie möglich zu beschreiben. Dieses kann in einfacher Weise

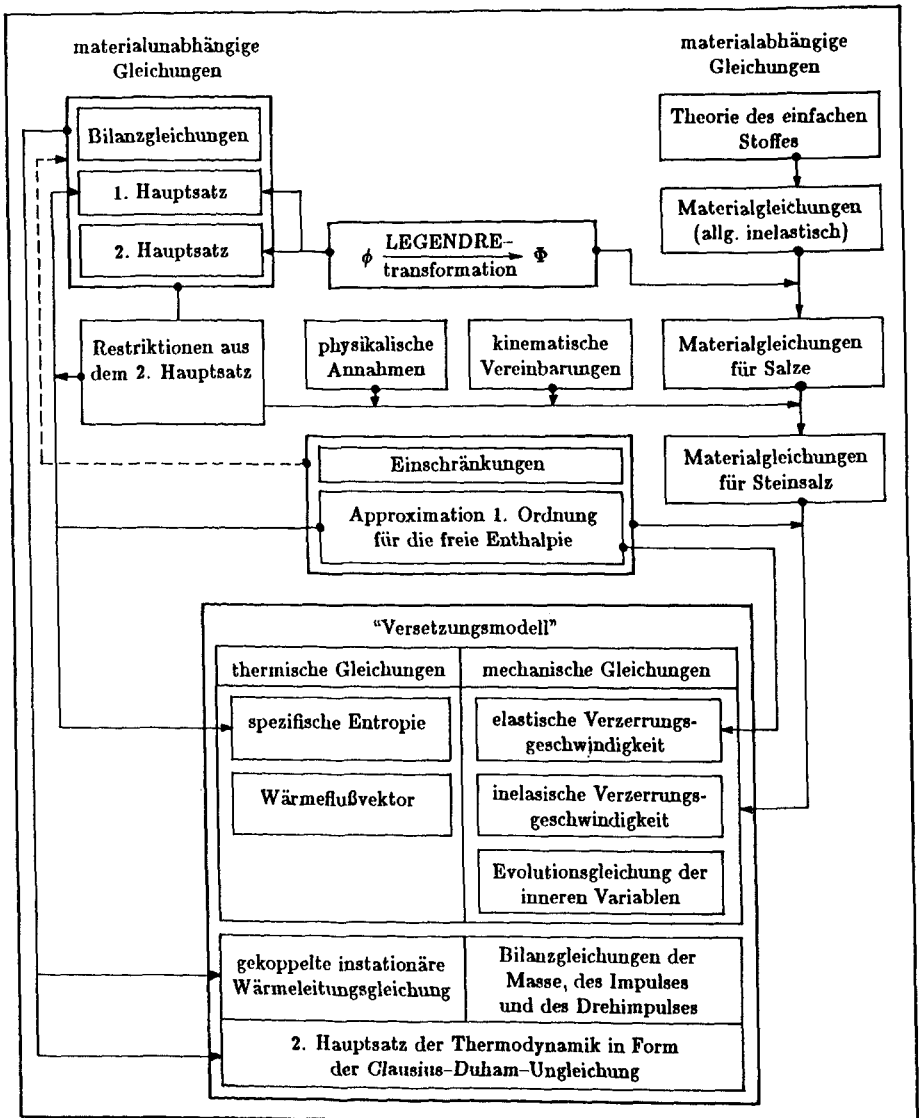


Bild 2.1:

Kontinuumsmechanische Begründung des „Versetzungsmodells“

durch sog. „curve-fitting“ geschehen. Sollen aber Aussagen bzgl. des Materialverhaltens über lange Zeiträume, die die Standzeit von Proben im Labor weit überschreiten, getroffen werden, reicht diese Vorgehensweise nicht mehr aus. Das gleiche gilt für die Extrapolation von Versuchsergebnissen auf Spannungs- und Temperaturbereiche, für die keine Experimente durchgeführt werden können. Es ist deshalb zu fordern, daß die konstitutiven Gleichungen in der Lage sein sollten, das Materialverhalten für jede Belastungsgeschichte innerhalb des Anwendungsrahmens korrekt vorauszusagen, auch und gerade wenn dieser die Grenzen des experimentell Möglichen überschreitet. Diesen Anforderungen kann unseres Erachtens nur ein „thermodynamisch-konsistentes“ Stoffgesetz gerecht werden.

Das „Versetzungsmodell“ von *Olschewski et al.* (1981) [siehe auch *Wetjen et al.* (1983) und *Stein/Wetjen* (1984)] basiert auf der Theorie der Zustandsvariablen oder auch der Theorie der inneren Variablen. Das inelastische Verhalten des Steinsalzes wird bei dieser Theorie durch die Form der Evolutionsgleichung der inneren Variablen beschrieben. Dadurch ist es auch möglich, die für die inelastischen Verformungen verantwortlichen Gitterfehler in die phänomenologische Betrachtung einzubeziehen. Der „innere Zustand“ des kristallinen Körpers wird daher allgemein durch einen Satz von inneren Zustandsvariablen  $q_\alpha$  und inneren Zustandsparametern  $\xi_\beta$  dargestellt. Die Zustandsvariablen können skalaren, vektoriellen oder auch tensoriellen Charakter besitzen. Die Zustandsparameter repräsentieren Größen, die bei der Bewegung unverändert bleiben. Hierdurch können z.B. Kristall- und Phasengrenzen dargestellt werden. Im einfachsten Fall kann die innere Struktur und damit die Belastungsgeschichte mit einer einzigen skalarwertigen Zustandsvariablen beschrieben werden. Von dieser Möglichkeit wurde beim „Versetzungsmodell“ Gebrauch gemacht. Bild 2.1 zeigt schematisch die Herleitung und Begründung des „Versetzungsmodells“.

Ausgangspunkte im Rahmen der Kontinuums-Theorie, wie bereits ausgeführt, sind zwei Gruppen von Gleichungen.

Die erste ist diejenige der **materialunabhängigen** Gleichungen, wie

- die Bilanzgleichungen der Masse, des Impulses und des Drehimpulses,
- die Energiebilanz oder der 1. Hauptsatz der Thermodynamik und
- das Dissipationspostulat (2. Hauptsatz der Thermodynamik) in der Form der *Clau-sius-Duham*-Ungleichung (CDU).

Die Auswertung der CDU nach der von *Coleman/Noll* (1963) vorgeschlagenen Methode führt zu folgenden Restriktionen<sup>2)</sup>:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{g}_\kappa} = 0, \quad (2.13)$$

$$\mathbf{E}^{\text{el}} = - \mathbf{e}_\kappa \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{S}}, \quad (2.14)$$

$$\eta = - \frac{\partial \Phi}{\partial \Theta}. \quad (2.15)$$

<sup>2)</sup>  $\Phi$  ist die spezifische freie Enthalpie (siehe Gleichung 2.16).



Die zweite Gruppe ist die der **materialabhängigen** oder auch konstitutiven Gleichungen. Zu ihrer Konstruktion wird die von *Noll* (1958/59) vorgeschlagene **Theorie des einfachen Stoffes** benutzt, die auf folgenden Prinzipien basiert:

- Das Prinzip der **materiellen Objektivität**, das aussagt, daß die mathematische Struktur der Materialgleichung nicht vom Standort oder einer Drehung des Beobachters abhängig sein darf.
- Das Prinzip der **lokalen Wirkung**, das den Einflußbereich eines materiellen Punktes auf seine unmittelbare Umgebung begrenzt. Hierdurch wird die Bewegung durch den Deformationsgradienten beschrieben.
- Das Prinzip des **Determinismus**, das den Verzerrungstensor  $\mathbf{E}$ , die Temperatur  $\Theta$ , den Temperaturgradienten  $\mathbf{g}_x$  und die internen Zustandsvariablen  $\mathbf{q}_\alpha, \xi_\beta$  als unabhängige Variable festlegt. Damit sind die übrigen Variablen, wie die freie Energie  $\psi = \phi - \Theta\eta$ , die Entropie  $\eta$ , der 2. *Piola-Kirchhoff*-Spannungstensor  $\mathbf{S}$ , der Wärmeflußvektor  $\mathbf{h}_x$  und die Evolutionsgleichungen der internen Variablen  $\dot{\mathbf{q}}_\gamma$  für stabile Konfigurationen eindeutig bestimmbar.

Auf diese Weise erhält man Materialgleichungen, die ein allgemeines zeitabhängiges inelastisches Materialverhalten beschreiben, und zwar in Abhängigkeit von den Verzerrungen, der Temperatur und der inneren Struktur.

*Lehmann* (1979) weist darauf hin, daß eine inelastische Verzerrung, die auf einer ungestört durch den Kristall laufenden Versetzung beruht, zwar zu einer bleibenden Deformation führt, nicht aber den „inneren“ Zustand des Materials verändert. Ähnlich kann bei punktförmigen Gitterfehlern, die für das viskose Materialverhalten verantwortlich sind, argumentiert werden. Deshalb erscheint der Spannungstensor geeigneter als der Verzerrungstensor, neben den internen Variablen den inneren Zustand eines polykristallinen Materials zu beschreiben. Aus diesem Grunde wird der 2. *Piola-Kirchhoff*'sche Spannungstensor als unabhängige Variable eingeführt. Hierfür ist es zweckmäßig, im 1. Hauptsatz der Thermodynamik die **spezifische freie Enthalpie**

$$\Phi = \phi - \Theta\eta - \frac{1}{\varrho_x} \mathbf{S} \cdot \mathbf{E}^{\text{el}}, \quad (2.16)$$

die man durch eine *Legendre*-Transformation aus der inneren Energie gewinnen kann, zu verwenden. So erhalten wir einen Satz Materialgleichungen für polykristallines Material in Abhängigkeit von Spannungen, Temperatur, Wärmeflußvektor und innerer Struktur. Ferner wird das *Fourier*-Gesetz der Wärmeleitung als gültig angesehen.

Für die Beschreibung des Materialverhaltens von Steinsalz ist dieses Gesetz noch zu allgemein. Daher werden folgende physikalische Annahmen getroffen:

- Es existiert ein **elastischer** Bereich.
- Die Versetzungsbewegung wird durch einen **athermischen** und einen **thermischen** Anteil beeinflusst. Der athermische Anteil wird durch inelastische Deformationen hervorgerufen. Der thermische Anteil beschreibt den Prozeß des Versetzungskletterns, bei dem infolge thermischer Aktivierung bei der Versetzungsbewegung entstehende Verknäuelungen von Versetzungen an Hindernissen aufgelöst werden

können, wobei es zur Polygonisierung des Kristallgitters, d.h. zur Bildung von Kleinwinkelkorngrenzen, kommt. Dadurch spaltet sich die Evolutionsgleichung der inneren Variablen auf in einen athermischen und einen thermischen Anteil.

Mit der kinematischen Vereinbarung, daß sich die Verzerrungsgeschwindigkeit additiv aus einem **elastischen** und einem **inelastischen** Anteil zusammensetzt und unter Nutzung der Restriktionen aus dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik erhält man nun allgemeine Stoffgleichungen für Steinsalz.

Wie *Olschewski et al.* (1981) ausführen, ist eine derart allgemeine Materialgleichungsstruktur bisher für kein reales Material identifiziert worden. Dieses Stoffgesetz enthält noch zu viele unbekannte Materialparameter, so daß weitere sinnvolle Einschränkungen zu machen sind. Deshalb wird weiter gefordert:

- **Isotropie.** Dadurch reduziert sich die Anzahl der Elastizitätskonstanten von 21 auf 2, die sog. *Lamé*-Konstanten, durch die sich auch der Elastizitätsmodul und die Querkontraktionszahl sowie der Gleitmodul  $G$  und der Kompressionsmodul  $K$  ausdrücken lassen [siehe hierzu z.B. *Leipholtz* (1968), *Stein* (1984)].
- Einschränkung der inneren Struktur auf nur noch **eine skalare Zustandsvariable**, die mit einer Funktion der Versetzungsdichte identifiziert werden sollte ( $\{\mathbf{q}_\alpha, \xi_\beta\} \rightarrow \mu$ ). Die Versetzungsdichte ist nach allgemeiner Konvention definiert als die Anzahl der Versetzungsdurchstoßpunkte pro Fläche bei einem Schnitt durch einen Kristall. Hierdurch ist ein grobes Maß für den Defektzustand des Kristallgitters gegeben. Die der Zustandsvariablen  $\mu$  zugeordnete Energiedichte soll mit  $e$  bezeichnet werden.
- Die inelastischen Verzerrungen verlaufen **isochor**, d.h. bei der Deformation tritt keine Volumenänderung ein ( $\det \mathbf{F}^{\text{in}} = 1$ ).
- Die inelastischen Deformationen werden durch den Kugeltensoranteil des Spannungstensors nicht beeinflusst, d.h. sie sind vom mittleren Druck unabhängig.
- Zerlegung der freien Enthalpie in einen **elastischen** und einen **inelastischen** Anteil. Hierbei wird angenommen, daß der elastische Stoffgesetzanteil durch den inelastischen Anteil nicht beeinflusst wird, d.h. daß z.B. der Elastizitätsmodul nicht von der bisherigen inelastischen Deformation abhängt.
- **Approximation 1. Ordnung** für die freie Enthalpie in der Form

$$\varrho_x \Phi = -\mu_1 I_S^2 - \mu_2 II_S - \alpha I_S (\Theta - \Theta_x) - \varrho_x C_p \Theta \left( \ln \frac{\Theta}{\Theta_x} - 1 \right) + \mu e. \quad (2.17)$$

Hierdurch lassen sich für den elastischen Verzerrungsanteil und die spezifische Entropie explizite Darstellungen angeben.

- Beschränkung auf **kleine Deformationen**, d.h. auf eine geometrisch lineare Theorie mit  $\mathbf{F} \approx \mathbf{1}$ . Daraus folgt, daß der *Green-Lagrange*'sche Verzerrungstensor in den Verzerrungstensor der linearen Theorie übergeht und der 2. *Piola-Kirchhoff*-Tensor  $\mathbf{S}$  in den *Cauchy*'schen Spannungstensor  $\mathbf{T}$ .

Mit diesen Einschränkungen erhält man nun ein vereinfachtes mathematisches Modell zur Beschreibung des mechanischen und thermischen Verhaltens von Steinsalz.

Auf der einen Seite stehen thermische Gleichungen für

- die spezifische Entropie

$$\eta = - \frac{\partial \Phi}{\partial \Theta} = C_p \ln \frac{\Theta}{\Theta_x} + \frac{\alpha}{Q_x} I_T, \quad (2.18)$$

- den Wärmeflußvektor

$$\mathbf{h}_x = - \lambda (\Theta, \mu) \mathbf{g}_x \quad (2.19)$$

- und die instationäre Wärmeleitungsgleichung, die auch Kopplungsterme enthält:

$$- \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{E}}^{\text{in}} + Q_x \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \dot{\mu} + \alpha \Theta \dot{I}_T + Q_x C_p \dot{\Theta} + \text{Div } \mathbf{h}_x - Q_x \mathbf{r} = 0. \quad (2.20)$$

Diese Gleichung besteht aus einem **rein thermischen Anteil**, der der wohlbekannten instationären Wärmeleitungsgleichung entspricht, einem **gemischten Anteil**, welcher sowohl von der Temperatur als auch von der zeitlichen Änderung der ersten Invarianten des Spannungstensors abhängt, und einem **rein mechanischen Anteil**. Sie folgt direkt durch Anwendung der aus dem zweiten Hauptsatz folgenden Restriktionen auf den ersten Hauptsatz.

Auf der anderen Seite findet man Gleichungen für die mechanischen Größen wie

- die Geschwindigkeit der elastischen Verzerrungen

$$\dot{\mathbf{E}}^{\text{el}} = \mathbb{C} [\dot{\mathbf{T}}] + \alpha \mathbf{I} \dot{\Theta}, \quad (2.21)$$

- wobei  $\mathbb{C} = 2 G \mathbf{E} + 3 K \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}$  der Elastizitätstensor 4. Stufe ist,
- die Geschwindigkeit der inelastischen Verzerrungen

$$\dot{\mathbf{E}}^{\text{in}} = \langle \sigma_{\text{eff}} - k_0(\Theta) \mu \rangle \frac{3}{2} \left\{ k_1(\Theta) A(\Theta) \exp \left( - \frac{Q}{R \Theta} \right) \right\} \sigma_{\text{eff}}^{n-1} \mathbf{T}^D, \quad (2.22)$$

mit  $f = \sigma_{\text{eff}} - k_0(\Theta) \mu \geq 0$  und  $\sigma_{\text{eff}} = \sqrt{3 \Pi_{T^D}}$ ,

- und die Evolutionsgleichung der internen Variablen

$$\dot{\mu} = \langle f \rangle k_2(\Pi_{T^D}, \Theta) + k_3(\Theta) \mu. \quad (2.23)$$

Unter  $\mu$  ist hier der innere Parameter zu verstehen, der mit der Versetzungsdichte korreliert sein sollte. Ferner treten neben die Materialgleichungen (2.18) bis (2.23) noch die Bilanzgleichungen (in lokaler Darstellung) und zwar

materielle räumliche  
Darstellung

- die **Massenbilanz**

$$\rho(\mathbf{X}, t) \det \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \rho_x(\mathbf{X}) \quad \text{bzw.} \quad \dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}} = 0, \quad (2.24)$$

- die **Impulsbilanz**

$$\operatorname{Div} \mathbf{T}_x + Q_x \mathbf{b} = Q_x \ddot{\mathbf{x}}_x \quad \text{bzw.} \quad \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{b} = \rho \ddot{\mathbf{x}}, \quad (2.25)$$

– die **Drehimpulsbilanz**. Aus ihr folgt

$$\mathbf{T}_x \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \mathbf{T}_x^T \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{T} = \mathbf{T}^T, \quad (2.26)$$

und der **2. Hauptsatz der Thermodynamik**, hier in Form der *Clausius-Duham*-Ungleichung

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Q_x} \langle f \rangle k_1(\Theta) \sigma_{\text{eff}}^{n+1} - \langle f \rangle k_2(\Pi_{T^D}, \Theta) \frac{1}{Q_x} e \\ & - k_3(\Theta) \frac{1}{Q_x} \mu e + \frac{\lambda}{Q_x \Theta} \mathbf{g}_x \cdot \mathbf{g}_x \geq 0. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Unter der Voraussetzung zeitlich konstanter Spannungen, d.h. reinen Kriechens, kann die Differentialgleichung (2.23) gelöst und dadurch das gekoppelte Differentialgleichungssystem entkoppelt werden. Durch Integration erhält man mit den Abkürzungen

$$\omega = k_0 k_2 - k_3 \quad \text{und} \quad \mu_\infty = \frac{k_2}{\omega} \sqrt{3} \Pi_{T^D}$$

eine Lösung für die innere Variable, die gegen den Endwert  $\mu_\infty$  strebt,

$$\mu = (\mu_0 - \mu_\infty) e^{-\omega t} + \mu_\infty, \quad (2.28)$$

und für die Geschwindigkeit der inelastischen Verzerrungen folgt durch Einsetzen von (2.28) in (2.22)

$$\dot{\mathbf{E}}^{\text{in}} = \frac{3}{2} k_1 \left\{ k_0 e^{-\omega t} \left( \frac{k_2}{\omega} - \frac{\zeta}{k_0} \right) - \frac{k_3}{\omega} \right\} \sigma_{\text{eff}}^n \mathbf{T}^D, \quad (2.29)$$

mit  $\zeta = k_0 \mu_0 / \sigma_{\text{eff}}$ .

## 2.3 Parameterstudien und Sensibilitätsanalysen

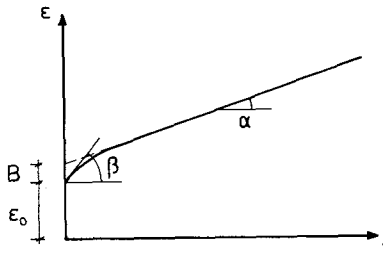
### 2.3.1 Bestimmung der Parameter des Versetzungsmodells

Für die Bestimmung der Parameter des Versetzungsmodells gehen wir von der Gleichung der Geschwindigkeit der inelastischen Verzerrungen in entkoppelter Form (2.29) aus. Die additive Zusammensetzung dieser Gleichung aus einem das Übergangskriechen beschreibenden Teil  $k_0 e^{-\omega t} \left( \frac{k_2}{\omega} - \frac{\zeta}{k_0} \right)$  und einem Anteil für das stationäre Kriechen  $\frac{k_3}{\omega}$  resultiert aus der Auswertung des Versetzungsmodells in gekoppelter Form [siehe Gl. (2.22) und (2.23)] für den eindimensionalen Kriechversuch und ist die Folge des einfachstmöglichen Ansatzes für  $\mu$  in Form der Gl. (2.28).

Mit der eindimensionalen Form des Versetzungsmodells

$$\begin{aligned} \epsilon^{\text{in}}(t) &= k_1 \sigma_0^n \left\{ \frac{k_0}{\omega} \left( \frac{k_2}{\omega} \sigma_0 - \mu_0 \right) (1 - e^{-\omega t}) - \frac{k_3}{\omega} \sigma_0 t \right\} \\ \mu(t) &= \left( \mu_0 - \frac{k_2}{\omega} \sigma_0 \right) e^{-\omega t} + \frac{k_3}{\omega} \sigma_0 \end{aligned} \quad (2.30)$$

kann eine typische Kriechkurve, wie sie in Bild 2.2 dargestellt ist, beschrieben werden.



$$\tan \alpha = - \frac{k_1 k_3}{\omega} \sigma_0^{n+1}$$

$$\tan \beta = \dot{\epsilon}^{in}(0) = (\sigma_0 - k_0 \mu_0) k_1 \sigma_0^n$$

$$B = \frac{\tan \beta - \tan \alpha}{\omega}$$

$$\epsilon^{in}(t) = B \left( 1 - e^{-\frac{\tan \beta - \tan \alpha}{B} t} \right) + \tan \alpha t$$

Bild 2.2:

Eindimensionale Kriechkurve

Durch Vergleich der Gleichung (2.30) mit den in Bild 2.2 angegebenen Gleichungen können die Parameter des Versetzungsmodells  $k_3$ ,  $k_0 k_2$  und  $k_1$  bestimmt werden:

$$\begin{aligned} k_3 &= - \frac{\tan \alpha (\tan \beta - \tan \alpha)}{k_1 \sigma_0^{n+1} B}, \\ k_0 k_2 &= \frac{(k_1 \sigma_0^{n+1} - \tan \alpha) (\tan \beta - \tan \alpha)}{k_1 \sigma_0^{n+1} B}, \\ k_1 &= \frac{\tan \beta}{\sigma_0^n (\sigma_0 - k_0 \mu_0)}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Auf diese Art kann das Versetzungsmodell einer Kriechkurve angepaßt werden. Für die Bestimmung aller Parameter im einzelnen reichen die Informationen, die wir aus dem einachsigen Kriechversuch erhalten, aber nicht aus. Hierzu müßten weitere Versuche durchgeführt werden, die insbesondere die Änderung des Versetzungszustandes erfassen und damit die Parameter  $k_2$  und  $k_3$  genauer bestimmbar machen. Der Parameter  $k_0$ , der den Zusammenhang zwischen dem Defektzustand des Kristalls und den effektiven Spannungen herstellt, müßte ebenfalls aus Versuchen und durch kristallographische Untersuchungen ermittelt werden.

Da uns selbst keine Versuchseinrichtungen zur Verfügung stehen, sind wir auf die Ergebnisse von Versuchen angewiesen, die an anderen Stellen ausgeführt wurden. So wurden z.B. an der Bundesanstalt für Geowissenschaften (Hannover) in den letzten Jahren umfangreiche Versuchsserien zum primären und stationären Kriechen durchgeführt; siehe hierzu z.B. *Albrecht et al.* (1978), *Wallner et al.* (1979), *Langer et al.* (1980), *Albrecht/Hunsche* (1980), *Wallner* (1984). Aber auch von anderen Autoren liegen Veröffentlichungen von Versuchsergebnissen vor. Im allgemeinen werden von den Verfassern nicht die Versuchsergebnisse selbst, sondern die daraus für das gerade gewählte Stoffgesetz ermittelten Materialparameter angegeben. In den meisten Fällen werden diese Parameter durch die Auswertung doppelt logarithmisch aufgetragener

Kriechgesetz	MENZEL / SCHREINER	THOMS et al.	LANGER et al.
$n$	$\tilde{n} - 1 = \frac{\theta \tilde{n}_0}{\theta_0 + \Delta\theta \tilde{m}_0} - 1$	$2b_1$	$\tilde{n} - 1$
$k_1$	$(24 \frac{\tilde{m}_0}{\tilde{m}} \tilde{K}^{\frac{1}{\tilde{m}_0}} e^{\frac{\Delta\theta\theta}{\theta_0\theta_0}})^{\tilde{n}}$	$B \theta^{b_2} 3^{-b_1} 142,25^{(2b_1+1)}$	$\frac{m A_p e^{-\frac{Q_p}{R\theta}} + A_s e^{-\frac{Q_s}{R\theta}}}{1-\zeta}$
$k_0 k_2$	$\frac{1-\zeta-\tilde{m} t^{*(\tilde{m}-1)}}{(1-\tilde{m}) t^{*\tilde{m}}} (1-\tilde{m} t^{*(\tilde{m}-1)})$	$1-(1-b_3) t^{*-b_3} \frac{1-\zeta(1-b_3) t^{*(1-b_3)}}{b_3 t^{*(1-b_3)}}$	$\frac{m^2 A_p e^{-\frac{Q_p}{R\theta}} + \zeta m A_s e^{-\frac{Q_s}{R\theta}}}{m A_p e^{-\frac{Q_p}{R\theta}} + A_s e^{-\frac{Q_s}{R\theta}}}$
$k_3$	$-\frac{1-\zeta-\tilde{m} t^{*(\tilde{m}-1)}}{(1-\tilde{m}) t^{*\tilde{m}}} \tilde{m} t^{*(\tilde{m}-1)}$	$-(1-b_3) \frac{1-\zeta-(1-b_3) t^{*-b_3}}{b_3 t^{*}}$	$-\frac{m A_s e^{-\frac{Q_s}{R\theta}} (1-\zeta)}{m A_p e^{-\frac{Q_p}{R\theta}} + A_s e^{-\frac{Q_s}{R\theta}}}$
geg.	$\tilde{m}_0, \tilde{n}_0, \tilde{K}, \zeta, t^*(\zeta)$	$B, b_1, b_2, b_3, \zeta, t^*(\zeta)$	$m, \tilde{n}, A_p, Q_p, A_s, Q_s, \zeta$
$\dot{\varepsilon}_{ij}^{in} = \frac{3}{2} k_1 \{ k_0 e^{-(k_0 k_2 - k_3) t} \left( \frac{k_2}{k_0 k_2 - k_3} - \frac{\zeta}{k_0} \right) - \frac{k_3}{k_0 k_2 - k_3} \} \sqrt{3 \Pi_{s_{ij}}}^n s_{ij}$			

Tabelle 2.1:  
Parameter des Versetzungsmodells

Ergebnisse aus einachsigen Kriechversuchen oder *Kármán*-Versuchen, bei denen zusätzlich zur Vertikallast noch ein Manteldruck auf die Probe aufgebracht wird, bestimmt. Da bei den meisten Stoffgesetzen aber angenommen wird, daß die inelastischen Deformationen vom mittleren Druck unabhängig sind, d.h.  $\sigma_{eff} = \sigma_z - \sigma_r$  gilt, bringt der *Kármán*-Versuch gegenüber dem Kriechversuch keine neuen Erkenntnisse.

Diese in Form von Materialparametern veröffentlichten Versuchsergebnisse lassen sich auch für das Versetzungsmodell nutzen. Durch einen Vergleich der verschiedenen Stoffgesetze in eindimensionaler integrierter Form mit dem Versetzungsmodell

$$\varepsilon^{in} = k_1 \left\{ \frac{k_0}{\omega} \left( \frac{k_2}{\omega} - \frac{\zeta}{k_0} \right) (1 - e^{-\omega t}) - \frac{k_3}{\omega} t \right\} \sigma^{n+1} \quad (2.32)$$

können die Parameter  $k_1$ ,  $k_0 k_2$  und  $k_3$  sowie der Spannungsexponent  $n$  bestimmt werden. Da Verfestigungsgesetze nur primäres Kriechen beschreiben können, muß bei Vergleich mit diesen ein Zeitpunkt  $t^*$  festgelegt werden, an dem das Primärkriechen praktisch abgeklungen ist und sich ein stationäres Kriechen eingestellt hat. Nach Langer et al. (1980) ist dieser Zeitpunkt nach etwa 10 bis 15 Tagen erreicht. Tabelle 2.1 zeigt die Parameter des Versetzungsmodells, die nach den Stoffgesetzen

1. Dehnungsverfestigungsgesetz von *Menzel/Schreiner* (1975–1978)

$$\epsilon^{\text{in}} = \tilde{m}^{-\tilde{m}} A_0^{\tilde{m}} \left( e^{\frac{\Delta\Theta}{\Theta_k \Theta_0}} \right)^{\tilde{m}} \sigma^{\beta \tilde{m}} t^{\tilde{m}} = \tilde{K} \sigma^{\tilde{n}} t^{\tilde{m}}, \quad (2.33)$$

mit  $\tilde{m} \approx 1 / (1 + \frac{\Theta_0}{\Theta} \mu_0)$  und  $\Theta_k \approx 10 \text{ K}$ .

2. Zeitverfestigungsgesetz von *Thoms/Char/Bergeron* (1972)

$$\epsilon^{\text{in}} = B 3^{-b_1} \Theta^{b_2} (1 - b_3)^{-1} t^{1-b_3} \sigma^{2b_1+1} = \bar{K} \sigma^{\tilde{n}} t^{\tilde{m}} \quad (2.34)$$

3. Strukturtheologisches *Weertman* (1968)-Gesetz von *Langer et al.* (1980)

$$\epsilon^{\text{in}} = A_p e^{-\frac{Q_p}{R\Theta}} (1 - e^{-m_1 t}) \sigma^{\tilde{n}} + A_s e^{-\frac{Q_s}{R\Theta}} \sigma^{\tilde{n}} t \quad (2.35)$$

bestimmt wurden.

2.3.2 Zum Problem der Identifizierung des inneren Parameters  $\mu$ 

Den bisher zum Vergleich genommenen empirischen Gesetzen ist gemein, daß bei ihnen neben den Werten für  $n$ ,  $k_1$  und  $k_3$  nur das Produkt  $k_0 k_2$  aus dem Vergleich mit den phänomenologischen Gesetzen bestimmt werden kann. Für die Bestimmung von  $k_0$  und  $k_2$  im einzelnen müssen deswegen andere Kriterien herangezogen werden. Zudem wurde bisher der innere Parameter  $\mu$  noch nicht eindeutig identifiziert. Jedoch ermöglicht dies nur das Gesetz von *Langer/Hunsche*, da hier primäres und stationäres Kriechen gemeinsam beschrieben werden.

Für stationäres Kriechen  $\dot{\epsilon} = \text{const.}$  ergibt sich auch  $\mu = \text{const.}$  bzw.  $\dot{\mu} = 0$ . Der stationäre Wert für  $\mu$  ergibt sich dann nach Gl. (2.23) zu

$$\mu_{\infty} = \frac{k_2}{\omega} \sqrt{3 \Pi_{T^0}} = \frac{k_2}{\omega} \sigma_{\text{eff}}. \quad (2.36)$$

Der Vergleich mit experimentellen und theoretischen Befunden [siehe hierzu: *Argon* (1970), *Kemter* und *Strunk* (1977), *Gupta* und *Li* (1970) u.a.m.], zur Versetzungsdichte, die hier mit  $q$  bezeichnet werden soll, zeigt

$$\sigma_{\text{eff}} = 2 \alpha_r b G \sqrt{q}. \quad (2.37)$$

$\alpha_r$  ist ein dimensionsloser Faktor,  $0.2 \leq \alpha_r \leq 0.8$ ,  $b$  ist die Gitterkonstante und  $G$  der Schermodul. Übereinstimmung läßt sich nur erreichen, wenn man

$$\mu = \sqrt{q} \quad (2.38)$$

und

$$\frac{\omega}{k_2} = 2 \alpha_r b G \quad (2.39)$$

setzt. Daraus folgt

$$k_2 = \frac{\omega}{2 \alpha_r b G} = \frac{m}{2 \alpha_r b G} \quad (2.40)$$

(mit  $\omega = m$  nach *Langer/Hunsche*). Durch Differenzieren von Gl. (2.38) erhält man

$$\dot{\mu} = \frac{\dot{\varrho}}{2\sqrt{\varrho}}. \quad (2.41)$$

Überträgt man die Gleichungen (2.39) und (2.41) in Gl. (2.23), so erhält man die Gleichungen

$$\dot{\varrho} = 2 k_2 \sqrt{\varrho} (\alpha_{\text{eff}} - 2 \alpha_r b G \sqrt{\varrho}) = 2 k_2 \sqrt{\varrho} \sigma_{\text{wirk}}. \quad (2.42)$$

$\sigma_{\text{wirk}}$  ist die noch wirksame Deviatorspannung nach Abzug der inneren Reibspannung. Empirische Gesetze zur Versetzungsmultiplikation [siehe z.B.: *Peissker et al.* (1962), *Haasen* (1968), *Coghlan et al.* (1971)] ergeben

$$\dot{\varrho} = \kappa_q \varrho v \sigma_{\text{wirk}}. \quad (2.43)$$

$\kappa_q$  ist eine experimentell gefundene Konstante,  $v$  die Geschwindigkeit der Versetzungen. Über direkten Vergleich von Gl. (2.42) mit Gl. (2.43) erhält man

$$v = \frac{2 k_2}{\kappa_q \sqrt{\varrho}}. \quad (2.44)$$

Bei hohen Versetzungsdichten erscheint dieser Ansatz sicher sinnvoll. Wird eine bewegliche Versetzung von anderen Versetzungen für eine durchschnittliche Zeit  $\Delta t$  aufgehalten, bevor sie diese durchdringen kann und ist die Zeit zum Durchlaufen der Strecke  $d$  bis zur nächsten Versetzung klein gegen  $\Delta t$ , so ergibt sich als mittlere Geschwindigkeit

$$v \approx \frac{d}{\Delta t} = \frac{1}{\sqrt{\varrho}} \frac{1}{\Delta t}. \quad (2.45)$$

Die Identität von  $d$  und  $1/\sqrt{\varrho}$  läßt sich leicht geometrisch zeigen. Wenn man  $2 k_2/\kappa_q = 1/\Delta t$  setzt, so scheint die Identifizierung von  $\mu$  mit  $\sqrt{\varrho}$  durchaus gerechtfertigt zu sein. Der Vergleich mit den Daten des Gesetzes von *Langer/Hunsche* ergibt  $\Delta t$  jedoch als nahezu konstant, was relativ unwahrscheinlich ist, da diese nach *Gilman* (1968) stark spannungs- und auch temperaturabhängig sein sollte. Wenn sowohl die Versetzungsdichte  $\varrho$  als auch deren mittlere Geschwindigkeit  $v$  bekannt sind, ergibt sich auch die Verzerrungsgeschwindigkeit  $\dot{\epsilon}$  als

$$\dot{\epsilon} = \phi b \varrho v. \quad (2.46)$$

$\phi$  ist hier ein geometrischer Faktor von der Größenordnung 1,  $b$  die Gitterkonstante. Durch Einsetzen von (2.44) in (2.46) ergibt sich jedoch

$$\dot{\epsilon} = \phi b \frac{2 k_2}{\kappa_q} \sqrt{\varrho}. \quad (2.47)$$

Dieser Zusammenhang gibt jedoch nicht die experimentell beobachteten Vorgänge wieder, so daß die Auffassung des Parameters  $\mu$  als Versetzungsdichte oder Wurzel daraus nicht möglich erscheint. Er ist jedoch als formaler Parameter geeignet, der im



Zusammenhang mit Gl. (2.22) statt (2.46) das primäre und stationäre Kriechen richtig beschreibt. Die Verwendung der obigen Evolutionsgleichungen (2.22) und (2.23) hat allerdings den Vorteil, daß sie als Differentialgleichungen auch transiente Vorgänge zu beschreiben vermögen. Derzeit wird in unserem Institut der Versuch unternommen, ein Stoffgesetz für Salz zu entwickeln, das auf den physikalischen Mechanismen der Versetzungsbewegungen und -wechselwirkungen basiert.

### 2.3.3 Sensibilitätsanalysen

Wie bereits oben angeführt geschieht die Parameterbestimmung meistens durch Auswertung doppeltlogarithmisch aufgetragener Versuchsergebnisse. Hierbei wird mit Hilfe des kleinsten Fehlerquadrats oder auch nach Augenschein i. a. eine Gerade durch weit streuende Versuchsergebnisse gelegt. Um den Einfluß kleiner Ungenauigkeiten oder Abweichungen des Stoffgesetzes vom Versuchsergebnis zu ergründen, wurden Sensibilitätsanalysen für verschiedene Stoffgesetze durchgeführt; siehe *Wetjen/Heemann* (1985) und *Stein/Wetjen* (1985). In diese Untersuchungen wurden die Stoffgesetze (2.32) bis (2.35) einbezogen. Sie beziehen sich auf die jeweils in den Originalarbeiten angegebenen Parameterwerte für die dort verwendeten Salze. Die Bilder 2.3 bis 2.6 zeigen die mit den angegebenen Stoffgesetzen berechneten Kriechkurven bei einer konstanten Temperatur von 100°C und einer einachsigen Druckbelastung von 10 MPa über einen Zeitraum von 100 Tagen. Neben den Stoffparametern sind auch Temperatur und Spannung in die Untersuchung mit einbezogen worden. Die gestrichelt gezeichnete Kurve stellt die nach dem Stoffgesetz berechnete Kriechkurve dar. Die übrigen Kurven erhält man, wenn man jeweils den am Ende der entsprechenden Kurve eingetragenen Parameter um 5% erhöht.

Bild 2.3 zeigt die Sensibilität des Dehnungsverfestigungsgesetzes nach *Menzel/Schreiner* (1975–1978). Das betrachtete Material ist ein Staßfurt-Steinsalz der DDR. Nach 100 Tagen weicht die auf Parameteränderungen um 5% beruhende Kriechkurve um ca.  $\pm 40\%$  von der Originalkurve ab. Die empfindlichsten Parameter sind hier der Dehnungsexponent  $m$ , die Temperatur und der Spannungsexponent  $n$ . Der Einfluß der Temperatur vergrößert sich mit der Zeit noch ein wenig (für 10.000 Tage auf 47%), während der relative Einfluß des Verzerrungsexponenten mit der Zeit leicht abklingt (nach 10.000 Tagen auf  $-38\%$ ). Verglichen mit anderen Stoffgesetzen erweist es sich aber als verhältnismäßig unempfindlich.

Die Parameterwerte für das in Bild 2.4 dargestellte Zeitverfestigungsgesetz von *Thoms/Char/Bergeron* (1972) wurden aus Messungen an Pfeiler-Modellen aus Steinsalz gewonnen. Eine Variation um 5% führt bei den meisten Parametern nach 100 Tagen zu einer Abweichung, die zwischen  $-12\%$  und  $+92\%$  liegt. Das Stoffgesetz reagiert aber extrem auf eine Änderung des Temperaturexponenten. Im Falle des hier betrachteten Salzes beträgt die Abweichung mehr als 1600% bei einer Parameteränderung um 5%.

Den Darstellungen in Bild 2.5 und 2.6 liegen Asse-Steinsalze zugrunde. Die Materialparameter wurden von *Langer et al.* (1980) angegeben und beruhen auf der Aus-

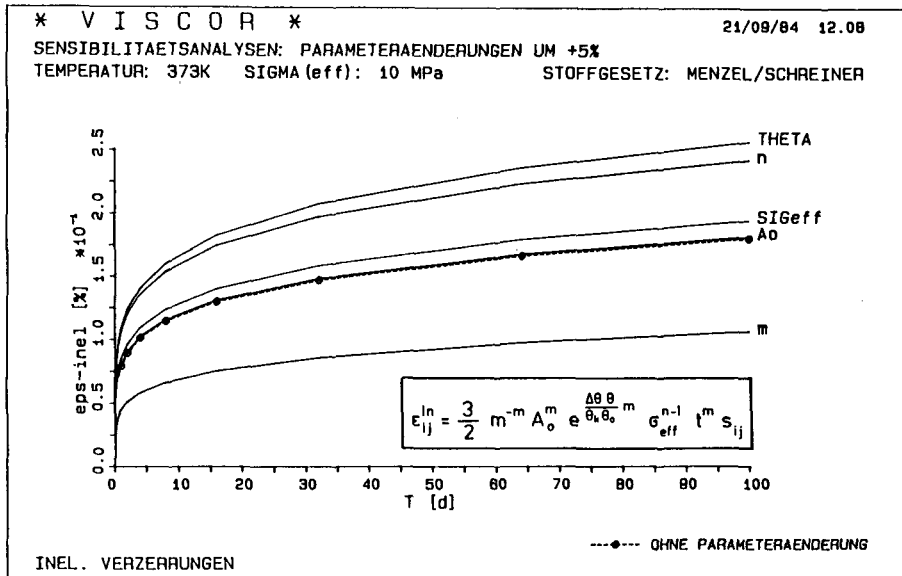


Bild 2.3:

Sensibilität des Dehnungsverfestigungsgesetzes von Menzel/Schreiner

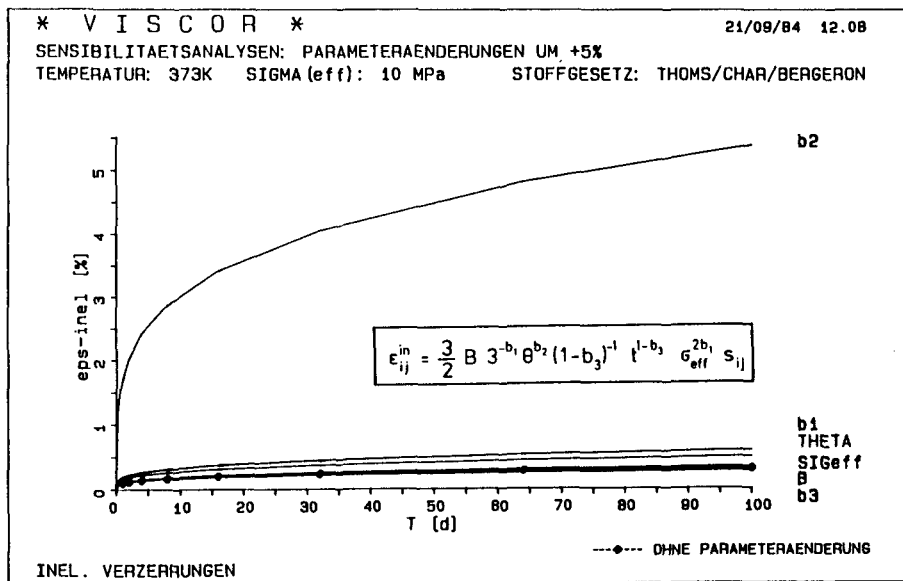


Bild 2.4:

Sensibilität des Zeitverfestigungsgesetzes von Thoms/Char/Bergeron

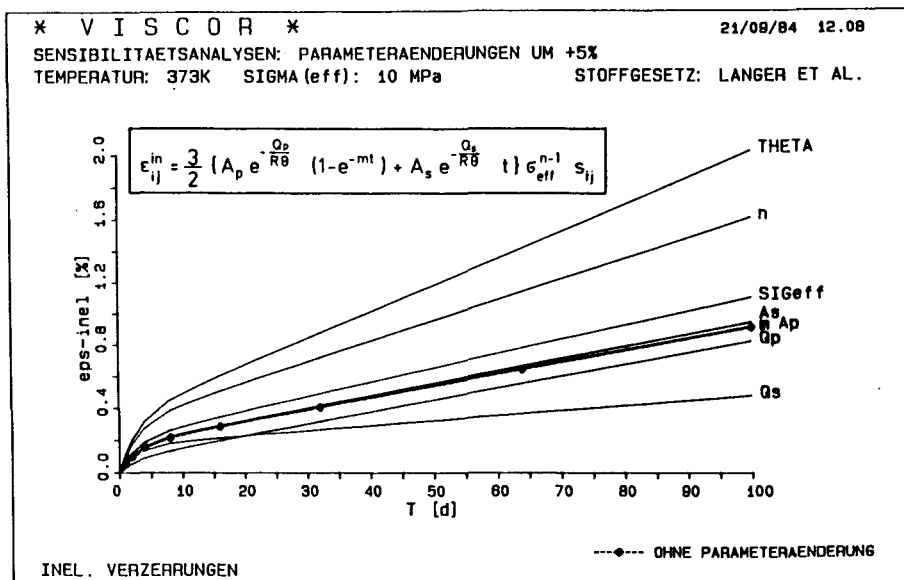


Bild 2.5:

Sensibilität des Weertman-Gesetzes von Langer et al.

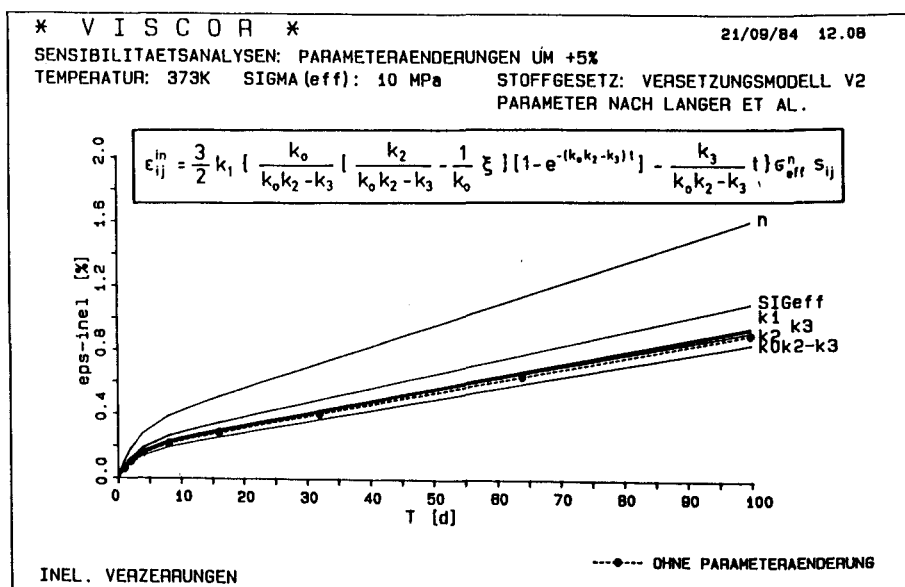


Bild 2.6:

Sensibilität des „Versetzungsmodells“. Parameterbestimmung nach Stoffgesetz Langer et al.

wertung von 78 Kriechversuchen. Das Verhalten des Kriechgesetzes von *Langer et al.* ist in Bild 2.5 dargestellt. Eine Parameteränderung um +5% führt hier nach 100 Tagen zu einer Abweichung der Kriechkurve zwischen -47% und 124%. Dieses Stoffgesetz ist bezüglich einer Temperaturänderung besonders empfindlich. Die Abweichung der Kriechkurve um 124% nach 100 Tagen steigt im weiteren Zeitverlauf noch leicht an (für 10.000 Tage auf 129%). Der Einfluß der das Primärkriechen beschreibenden Parameter  $A_p$ ,  $Q_p$ ,  $m$  und des Struktur faktors  $A_s$  ist gering bzw. klingt schnell ab. Nur eine Änderung der Aktivierungsenergie  $Q_s$  für das stationäre Kriechen führt zu einer etwas größeren Beeinflussung des Ergebnisses. Hier erhalten wir bei einer fünfprozentigen Erhöhung nach 100 Tagen eine um ca. 47% zu kleine Kriechverzerrung. Dieser Fehler nimmt mit der Zeit noch geringfügig auf -58% in 10.000 Tagen zu.

Bei Verwendung des „Versetzungsmodells“ und Bestimmung der Parameter auf der Grundlage der von *Langer et al.* angegebenen Werte erhalten wir die Kriechkurven in Bild 2.6. Der Einfluß der Temperatur, des Spannungsexponenten und der Spannung selbst ist gleich dem in Bild 2.5 gezeigten. Eine Veränderung der übrigen Parameter des „Versetzungsmodells“ beeinflusst das Ergebnis nur sehr wenig. Die Abweichungen von der ungestörten Kriechkurve liegen hier zwischen -6.5% und +5%. Ein Fehler im Parameter  $k_2$  klingt im Laufe der Zeit vollkommen ab, während er für den Parameter  $k_3$  gegen die vorgegebene Abweichung von 5% strebt. Bemerkenswert ist, daß für den Parameter  $\omega = k_0 k_2 - k_3$  in der Primärphase ein Anwachsen des Fehlers, danach aber eine Verringerung zu beobachten ist.

Diese Studien zeigten, daß alle untersuchten Stoffgesetze mit Ausnahme des „Versetzungsmodells“ auf eine kleine Veränderung je eines einzelnen Materialparameters mit einer prozentual größeren Abweichung des Ergebnisses antworten [Ausnahme:  $A_0$  aus (2.33),  $B$  aus (2.34) und  $A_p$  und  $m$  aus (2.35)]. Bei allen Stoffgesetzen ist eine besonders hohe Sensibilität bezüglich Temperaturänderungen festzustellen. Dieser Tatsache ist bei der numerischen Berechnung des thermo-mechanischen Kriechproblems Rechnung zu tragen.

#### 2.3.4 Temperaturabhängigkeit der elastischen und thermischen Materialeigenschaften

Aus Kriechversuchen bei verschiedenen Temperaturen ist bekannt, daß die Verzugsgeschwindigkeit stark von der Temperatur abhängig ist. Diese Tatsache haben auch die oben vorgestellten Sensibilitätsanalysen bestätigt. Neben den in den Kriechgesetzen enthaltenen Stoffparametern, die die inelastischen Eigenschaften beschreiben, zeigen auch die die elastischen und thermischen Eigenschaften des Steinsalzes beschreibenden Parameter eine starke Temperaturabhängigkeit. *Nipp* (1982) hat die Temperatur- und Spannungsabhängigkeit dieser Parameter aus anderen Veröffentlichungen zusammengestellt und eigene Ansätze für die thermischen Stoffwerte vorgeschlagen. Für die **Wärmeleitfähigkeit** gibt er eine Potenzfunktion

$$\lambda = 1.24 \cdot 10^5 (\Theta + 1.10 \cdot 10^2)^{-1.66} \frac{\text{W}}{\text{mK}} \quad (2.48)$$

im Temperaturbereich von 170 bis 1070 K an. Die **Wärmekapazität** gehorcht nach *Nipp* ebenfalls einer Potenzfunktion

$$C_Q = 7.85 \cdot 10^2 \Theta^{0.155} \frac{\text{kJ}}{\text{m}^3 \text{K}} \quad (2.49)$$

Der Wärmeausdehnungskoeffizient zeigt eine lineare Abhängigkeit von der Temperatur

$$\alpha_\Theta = 3.1 \cdot 10^{-5} + 2.8 \cdot 10^{-8} \Theta \frac{1}{\text{K}}, \quad (2.50)$$

ebenso der Elastizitätsmodul nach *Wallner* (1979)

$$E = E_0 - \Delta E \cdot \Theta \quad (2.51)$$

mit  $E_0 = 26.000 \text{ MPa}$ ,  $\Delta E = 40 \text{ MPa/K}$  und  $\Theta$  in K.

Diese Temperaturabhängigkeit führt dazu, daß auch die Wärmeleitungsgleichung und damit die Temperaturfeldberechnung nichtlinear wird.

### 2.3.5 Parameterstudien

In den oben dargestellten Sensibilitätsanalysen ist der Einfluß einer kleinen Änderung der Ausgangstemperatur von  $100^\circ\text{C}$  gezeigt. Hier soll nun die Temperaturabhängigkeit der inelastischen Verzerrungsgeschwindigkeit in einem Bereich von  $0^\circ\text{C}$  bis

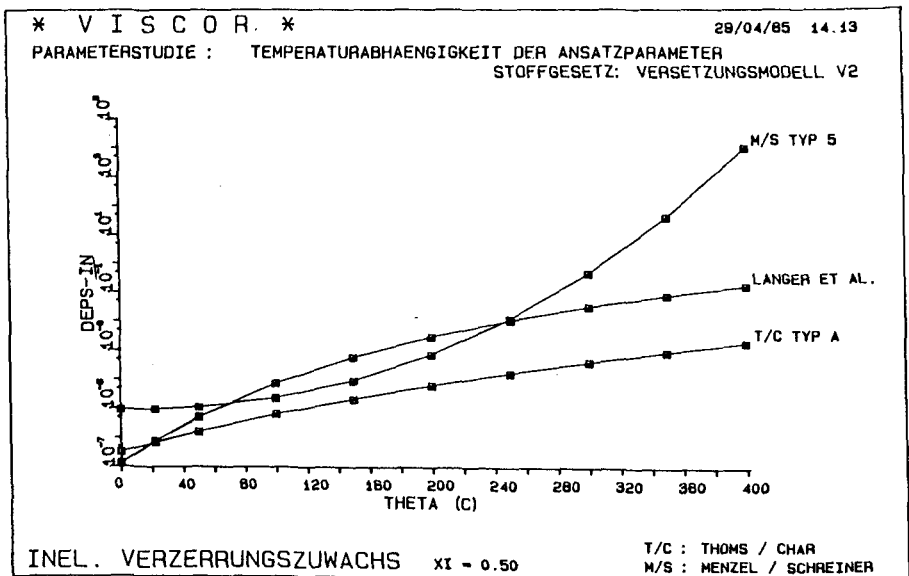
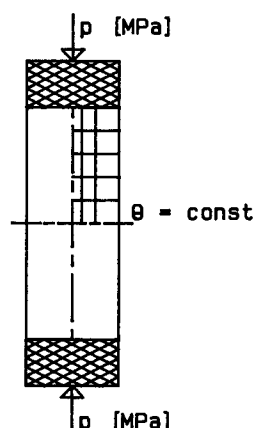


Bild 2.7:  
Temperaturabhängigkeit der Kriechrate für verschiedene Kriechgesetze

400°C gezeigt werden. Die Werte der in Bild 2.7 dargestellten Kurven sind mit dem Spannungsdeviator zu multiplizieren, um die Kriechrate zu erhalten. Die Kurven wurden mit dem „Versetzungsmode“l“ gerechnet, dessen Parameter gemäß Tabelle 2.1 für die dort aufgeführten Stoffgesetze ermittelt wurden. Es ist zu beachten, daß die Geschwindigkeit der inelastischen Verzerrungen logarithmisch aufgetragen sind. Die Temperaturabhängigkeit in der von *Menzel/Schreiner* angegebenen Form differiert sehr stark von den übrigen und wird im Bereich tieferer Temperaturen unserer Meinung nach nicht richtig beschrieben.

Alle bisher besprochenen Studien wurden eindimensional berechnet, daher war hierfür keine Finite-Element-Berechnung notwendig. Aber auch der gewöhnliche Kriechversuch kann streng genommen nur im mittleren Teil der Zylinderprobe als eindimensional betrachtet werden, da die Enden der Probe durch die Versuchseinrichtung an ihrer freien Ausdehnung gehindert werden und dadurch kein eindimensionaler Spannungszustand in der Probe mehr vorliegt. Bild 2.8 zeigt eine zylindrische Probe unter einachsiger Belastung und konstanter Temperatur. Die Temperaturabhängigkeit des Elastizitätsmoduls wurde in diesem Fall vernachlässigt. Die Presse ist durch 5 cm dicke Stahlplatten simuliert.



Benutzte Materialparameterwerte:

Stahl:  $E = 210.000 \text{ MPa}$ ,  $\nu = 0.333$

Steinsalz:  $E = 2.000 \text{ MPa}$ ,  $\nu = 0.45$

Kriechgestz: „Versetzungsmode“l“ mit Parametern nach *Langer et al.*

Abmessungen:  $h = 250 \text{ mm}$ ,  $d = 100 \text{ mm}$

Bild 2.8:

Zylinderprobe mit diskretisiertem Bereich

Die Verformung der Probe, wie sie in Bild 2.9 zu sehen ist, wurde mit dem Programmsystem VISCOR unter Verwendung rotationssymmetrischer Dreieckelemente mit quadratischem Verschiebungsansatz und linearem Temperaturansatz berechnet. Deutlich ist der Effekt der Faßbildung zu sehen, der aus der Dehnungsbehinderung der Probenenden resultiert. Im linken Bild wird die zeitliche Änderung der Kriechverformung bei konstanter Temperatur von 150°C gezeigt, und im rechten Bild ist die Verformung nach 50 Tagen bei verschiedenen Temperaturen zu sehen.

Der große Einfluß der Temperatur soll noch an den Bildern 2.10 und 2.11 verdeutlicht werden. Diese Bilder zeigen die Radialverschiebung des Meridians. So kann dem Bild 2.10 entnommen werden, daß eine Erhöhung der Temperatur von 125°C um 12.5%

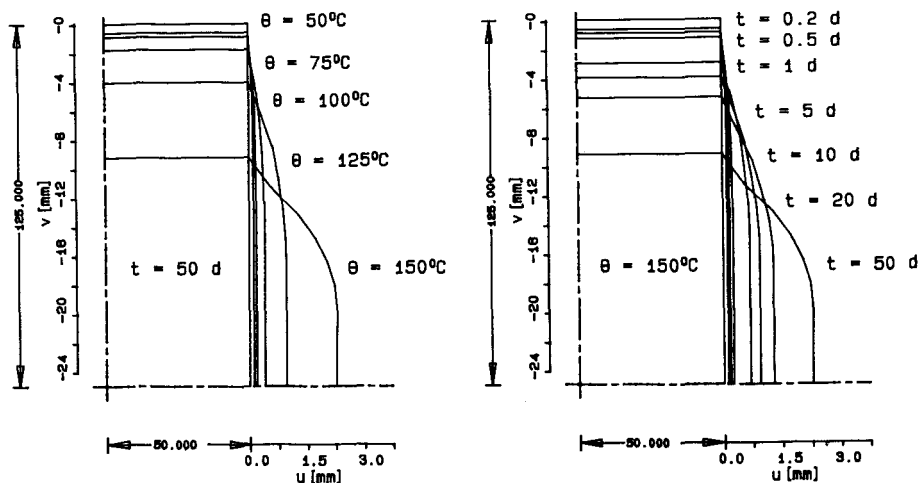


Bild 2.9:  
Verformte Probe bei 8 MPa Axialdruck (diskretisierter Bereich)

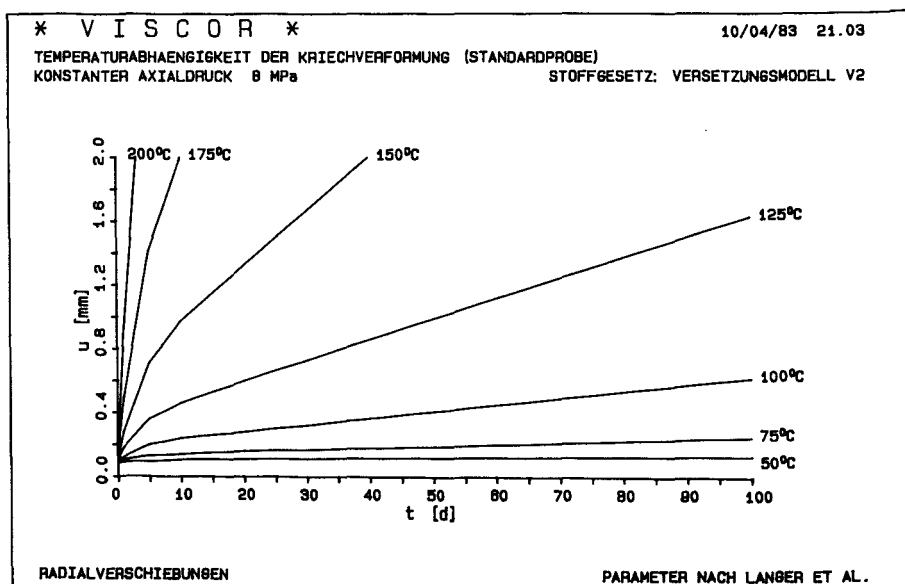


Bild 2.10:  
Zeitliche Änderung der Kriechverformungen

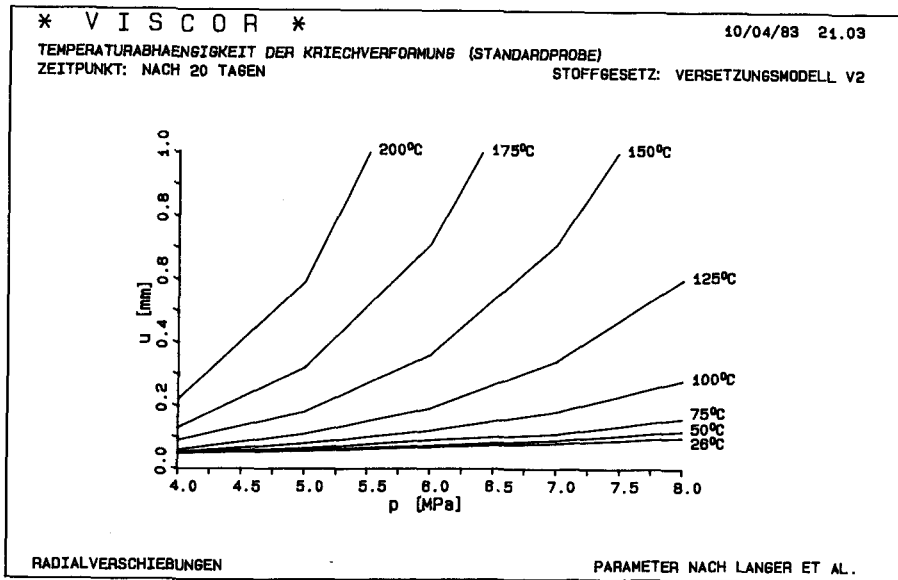


Bild 2.11:

Abhängigkeit der Radialverschiebungen von Last und Temperatur

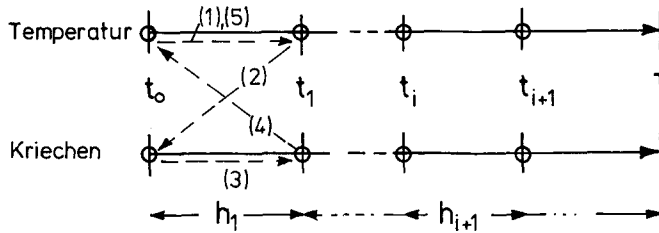
auf 175°C z.B. die Kriechzeit, in der dieselbe Verschiebung eintritt, von 100 Tage auf nur noch 6 Tage, d.h. um 84% verkürzt. Bild 2.11 zeigt die Lastabhängigkeit bei verschiedenen Temperaturen. So wird z.B. dieselbe Verschiebung bei 200°C und einer Axiallast von ca. 4 MPa erreicht, für die bei einer Temperatur von 100°C noch die doppelte Last erforderlich war.

### 3. Numerische Behandlung des thermo-mechanischen Kriechproblems

Die numerische Berechnung des thermo-mechanischen Kriechproblems zur Lösung von Rand- und Anfangswertproblemen erfolgt mit der Finite-Element-Methode in Verbindung mit einem geeigneten Differenzenverfahren zur Zeitintegration.

Grundlage des numerischen Konzeptes zur Entkopplung des thermo-mechanischen Gesamtproblems bildet die separate Betrachtung von Temperaturfeldberechnung und mechanischem Kriechen. Beide Problemkreise werden zunächst als Randwertproblem nach dem Galerkin-Verfahren räumlich diskretisiert und durch Integration in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen reduziert, das als Anfangswertproblem behandelt wird. Der gegenseitige Einfluß von Temperaturverteilung und Spannungsumlagerung kann durch sukzessives Einsetzen der Ergebnisse und Wiederholung der Berechnung berücksichtigt werden. In Bild 3.1 ist der Ablauf eines Algorithmus dargestellt.



**Algorithmus:**

- (1) Temperaturfeld bestimmen
- (2) (3) Kriechproblem unter Berücksichtigung der Temperatur lösen
- (4) (5) Temperaturfeld unter Berücksichtigung der mech. Größen (Spannungen) bestimmen
- ...
- etc.

Bild 3.1:

Algorithmus zur Entkopplung des thermo-mechanischen Kriechproblems

Es sei bemerkt, daß durch die vorweggenommene räumliche Diskretisierung die Informationsmöglichkeiten über die partiellen Differentialgleichungen für eine Fehleranalyse verlorengehen und damit derzeit kaum eine Basis für Fehlerindikatoren und Netzadaption mit gegenseitiger Beeinflussung von Raum- und Zeitintegration besteht.

### 3.1 Das instationäre Temperaturproblem

#### 3.1.1 FE-Formulierung des Temperaturproblems

Für die Finite-Element-Formulierung ist es sinnvoll, die Matrizen-Darstellung zu benutzen. Aus Gl. (2.20) erhalten wir dadurch und unter Berücksichtigung der Bewegungsgleichung (2.19)

$$-\mathbf{T}^T \dot{\mathbf{E}}^{\text{in}} + \alpha \Theta \dot{\mathbf{I}}_T + \rho C_p \dot{\Theta} - \mathbf{D}^T \Delta (\mathbf{D}\Theta) = \mathbf{Q}. \quad (3.1)$$

Zur Diskretisierung mit finiten Elementen gehen wir von der Wärmeleitungsgleichung (3.1), die für das infinitesimale Volumenelement hergeleitet wurde, zu globalen Bilanzbeziehungen im Volumen  $V$  und an der Oberfläche  $O$  über und erhalten so eine schwache Formulierung des Wärmeleitungsproblems. Dazu können wir die Methode der gewichteten Residuen, das *Galerkin*-Verfahren oder andere numerische Verfahren verwenden [siehe z.B. Argyris (1978) oder Zienkiewicz (1984)]. Eine allgemeine Formulierung der Energiebilanz kann durch die Verwendung der Methode der gewichteten Residuen erreicht werden. Hierbei muß das Residuum von (3.1) im abgeschlossenen Gebiet verschwinden. Analog zum Prinzip der virtuellen Arbeit wählen wir als Gewichtsfunktion ein „virtuelles Temperaturfeld  $\delta\Theta$ “, welches die Temperaturrandbedingungen exakt erfüllt. Die globale Wärmebilanzgleichung lautet dann, ausgehend von (3.1) ohne Berücksichtigung der Kopplungstherme und unter Einbeziehung der Wärmeübergangs-Randbedingung (3.6, 3,7)

$$\begin{aligned}
& \int_V \delta\Theta \varrho C_p \dot{\Theta} dV - \int_V \delta\Theta Q dV - \int_V \delta\Theta \mathbf{D}^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta) dV \\
& = - \int_{O_h} \delta\Theta \mathbf{D}_n^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta) dO + \int_{O_h} \delta\Theta \bar{h}_n dO.
\end{aligned} \quad (3.2)$$

Nach Teilintegration  $\delta\Theta \mathbf{D}^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta)$  gemäß  $\mathbf{D}^T [\delta\Theta \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta)] - (\mathbf{D} \delta\Theta)^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta)$  und Anwendung des *Gaußschen* Integralsatzes

$$\int_V \mathbf{D}^T [\delta\Theta \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta)] dV = \int_O \delta\Theta \mathbf{D}^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta) dO \quad (3.3)$$

erhalten wir die Wärmebilanzgleichung in ihrer endgültigen Form

$$\int_V \delta\Theta \varrho C_p \dot{\Theta} dV + \int_V (\mathbf{D} \delta\Theta)^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta) dV = \int_V \delta\Theta Q dV + \int_{O_h} \delta\Theta \bar{h}_n dO. \quad (3.4)$$

Zur vollständigen Beschreibung des instationären Wärmeleitproblems müssen zusätzlich zu den Feldgleichungen noch Anfangsbedingungen zur Beschreibung des Ausgangstemperaturzustandes sowie Randbedingungen zur Berücksichtigung gebietsweise vorgegebener Temperaturen oder Wärmeflüsse formuliert werden.

Als **Anfangsbedingung**  $\Theta(\mathbf{x}, t_0) = \Theta_0(\mathbf{x})$  wird für die Berechnung unterirdischer Hohlräume eine Temperaturverteilung entsprechend dem thermischen Gradienten des ungestörten Gebirges bzw. der stationäre Temperaturzustand nach Ausbruch des Hohlraumes vorgeschlagen.

**Randbedingungen** sind vorgeschriebene Wärmefelder, die auf die Oberfläche des Körpers einwirken. Solche Randbedingungen sind

– vorgeschriebene Temperaturen

$$\Theta(\mathbf{x}, t) = \bar{\Theta}(\mathbf{x}, t) \quad \text{auf } O_\Theta, \quad (3.5)$$

– vorgeschriebener Wärmestrom

$$h_n(\mathbf{x}, t) = \bar{h}_n(\mathbf{x}, t) \quad \text{auf } O_{h_n}. \quad (3.6)$$

Dabei ist  $h_n$  die Wärmemenge, die pro Zeiteinheit durch das Flächenelement  $dO_h$  mit der Normalen  $\mathbf{n}$  fließt:

$$h_n = \mathbf{n}^T \mathbf{h} = -\mathbf{n}^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta) = -\mathbf{D}_n^T \mathbf{\Lambda}(\mathbf{D}\Theta). \quad (3.7)$$

Ferner ist die Beschreibung des Wärmeüberganges durch Strahlung und Konvektion, der dem *Stefan-Boltzmann*-Gesetz gehorcht, möglich.

Durch Diskretisierung mit finiten Elementen im Raum führen wir das System partieller Differentialgleichungen auf ein System algebraischer Gleichungen zurück. Ein linearer Ansatz für das Temperaturfeld

$$\Theta(\mathbf{x}, t) = \omega(\mathbf{x}) \Theta_k(t) \quad (3.8)$$

mit den Knotentemperaturen  $\Theta_k$  liefert lineare thermische Verzerrungen und ist deshalb mit dem quadratischen Verschiebungsansatz der Kriechberechnung kompatibel. Mit diesem Ansatz erhalten wir aus Gleichung (3.4) die Matrixengleichung der instationären Wärmeleitung:

$$\int_V \varrho C_p \dot{\omega}^T \omega dV \dot{\Theta}_k + \int_V \omega^T D^T \Lambda D \omega dV \Theta_k = \int_V \omega^T Q dV + \int_O \omega^T \bar{h}_n dO. \quad (3.9)$$

Mit der Kapazitätsmatrix

$$C = \int_V \varrho C_p \omega^T \omega dV, \quad (3.10)$$

der Konduktivitätsmatrix

$$K = \int_V \omega^T D^T \Lambda D \omega dV \quad (3.11)$$

und den „treibenden Kräften“

$$\tilde{Q}_k = \int_V \omega^T Q dV + \int_O \omega^T \bar{h}_n dO \quad (3.12)$$

folgt aus Gl. (3.9)

$$C \dot{\Theta}_k + K \Theta_k = \tilde{Q}_k. \quad (3.13)$$

Nimmt man für die Intensität der Wärmequelle, d.h. die Wärmemenge, die pro Zeit- und Volumeneinheit erzeugt wird, eine lineare Abhängigkeit von der Temperatur an

$$Q(\mathbf{x}, t) = Q_0(\mathbf{x}, t) + Q_1(\mathbf{x}, t) \Theta(\mathbf{x}, t), \quad (3.14)$$

und sieht ebenso die vorgegebene Wärmezufuhr als lineare Funktion der Oberflächentemperatur an

$$\bar{h}_n(\mathbf{x}, t) = h_0(\mathbf{x}, t) + h_1(\mathbf{x}, t) \Theta(\mathbf{x}, t), \quad (3.15)$$

so führen die von der Temperatur abhängigen Terme zu zusätzlichen Anteilen in der Konduktivitätsmatrix.

Die treibenden Kräfte erhalten noch einen zusätzlichen Anteil aus vorgeschriebenen Knotentemperaturen. Durch Aufspaltung der Knotentemperaturen in unbekannte (Index L)- und vorgeschriebene (Index P)-Größen

$$\Theta = \Theta_L + \Theta_P \quad (3.16)$$

folgt für die schwache Form der Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{pmatrix} C_{LL} & C_{LP} \\ C_{PL} & C_{PP} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\Theta}_L \\ \dot{\Theta}_P \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} K_{LL} & K_{LP} \\ K_{PL} & K_{PP} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Theta_L \\ \Theta_P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_L \\ Q_P \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Diese Matrixgleichung liefert uns Bestimmungsgleichungen für die unbekannten Knotentemperaturen und die „treibenden Kräfte“, die aufgebracht werden müßten, um die vorgeschriebenen Temperaturen zu erzeugen. Zur Bestimmung der unbekannten Knotentemperaturen genügt uns die Gleichung:

$$\mathbf{C}_{LL} \dot{\Theta}_L + \mathbf{K}_{LL} \Theta_L = \mathbf{Q}_L - \mathbf{C}_{LP} \dot{\Theta}_P - \mathbf{K}_{LP} \Theta_P = \mathbf{Q}_L + \mathbf{Q}^\Theta. \quad (3.18)$$

In den weiteren Ausführungen ist der Vektor der unbekannten Knotentemperaturen  $\Theta_L$  mit  $\Theta$  bezeichnet.

### 3.1.2 Die Zeitintegration des Temperaturproblems

#### 3.1.2.1 Lösungsverfahren zur Zeitintegration

Mit Gl. (3.18) liegt ein Anfangswertproblem für ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung der Form

$$\begin{aligned} \dot{\Theta} &= \mathbf{f}(t, \Theta) \\ \Theta(t=0) &= \Theta_0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

vor. Einige Beispiele für Differenzenverfahren zur Lösung von Gl. (3.19) sind in der Tabelle 3.1 zusammengestellt. Hierbei kennzeichnet  $h$  das Zeitinkrement.

		Ordnung	imp./exp.
Euler-Predictor	$\Theta_{i+1} = \Theta_i + h \dot{\Theta}_i$	1	exp.
Euler-Corrector	$\Theta_{i+1} = \Theta_i + h \dot{\Theta}_{i+1}$	1	imp.
Zeta-Verfahren	$\Theta_{i+1} = \Theta_i + \mathbf{K}$ $\mathbf{K} = h \mathbf{f}(t + \zeta h, \Theta_i + \zeta \Delta \Theta)$	$\zeta = 0,5: 2$ $\zeta \neq 0,5: 1$	$\zeta = 0: \text{exp.}$ $\zeta \neq 0: \text{imp.}$
Trapez-Regel	$\Theta_{i+1} = \Theta_i + h/2 \times (\mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{i+1})$	2	imp.
Runge-Kutta (2. Ordnung)	$\Theta_{i+1} = \Theta_i + \frac{1}{2}(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2)$ $\mathbf{K}_1 = h \mathbf{f}(t_i, \Theta_i)$ $\mathbf{K}_2 = h \mathbf{f}(t_{i+1}, \Theta_i + \mathbf{K}_1)$	2	exp.
Runge-Kutta (4. Ordnung)	$\Theta_{i+1} = \Theta_i + \frac{1}{6}(\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4)$ $\mathbf{K}_1 = h \mathbf{f}(t_i, \Theta_i)$ $\mathbf{K}_2 = h \mathbf{f}(t_i + h/2, \Theta_i + \mathbf{K}_1/2)$ $\mathbf{K}_3 = h \mathbf{f}(t_i + h/2, \Theta_i + \mathbf{K}_2/2)$ $\mathbf{K}_4 = h \mathbf{f}(t_{i+1}, \Theta_i + \mathbf{K}_3)$	4	exp.

Tabelle 3.1:

Differenzenverfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen

Spezialfälle des Zeta-Verfahrens sind für  $\zeta = 1$  das Euler-Corrector- und für  $\zeta = 0$  das Euler-Predictor-Verfahren. Anforderungen an die Lösungsverfahren betreffen die **numerische Stabilität** und die **Genauigkeit**.

### 3.1.2.2 Zur Stabilität der Differenzenverfahren

Die numerische Stabilität ist ein komplexes Problem bei der Behandlung gewöhnlicher Differentialgleichungen [siehe hierzu z.B. *Lambert* (1983), *Butcher* (1987), *Burden et al.* (1981), *Smith* (1984)]. Wir fassen hier kurz einige wesentliche Merkmale zusammen.

Sind  $\lambda$  die Eigenwerte der Jacobi-Matrix  $\partial f / \partial \Theta$ , dann ist ein Algorithmus mit einem Differenzenverfahren numerisch stabil, wenn die Bedingung

$$|Q(\lambda h)| < 1 \quad (3.20)$$

eingehalten wird. Die Q-Funktion ist für einige Verfahren in Tabelle 3.2 zu finden. Erfüllt ein Differenzenverfahren die Bedingung

$$|Q(\lambda h)| < 1 \quad \forall \lambda h, \quad (3.21)$$

dann heißt es A-stabil. Gilt darüber hinaus

$$\lim_{\lambda h \rightarrow -\infty} Q(\lambda h) = 0, \quad (3.22)$$

dann ist es L-stabil. A-Stabilität gewährleistet, daß sich mit fortschreitender Rechnung Fehler verschiedener Art nicht aufschaukeln, während L-Stabilität eine Abnahme dieser Fehler zur Folge hat. Allgemein läßt sich zeigen, daß explizite Verfahren nicht A-stabil sein können [*Lambert* (1983)], und daher sollte die Anwendung dieser Verfahren stets mit der Bestimmung eines kritischen Zeitschrittes verbunden sein. Die Zusammenhänge sind in Tabelle 3.2 zu finden.

	$Q(\lambda h)$	A-stabil	L-stabil	$h_{\text{krit}}$
Euler-Predictor	$1 + \lambda h$	nein	nein	$2/\lambda$
Euler-Corrector	$1/(1 - \lambda h)$	ja	ja	—
Zeta-Verfahren	$\frac{1 + \lambda h(1 - \zeta)}{1 - \lambda h \zeta}$	$\zeta \geq 0.5$ , ja $\zeta < 0.5$ , nein	nein	—
Trapez-Regel	$\frac{1 + \frac{1}{2}\lambda h}{1 - \frac{1}{2}\lambda h}$	ja	nein	—
Runge-Kutta (2. Ordnung)	$1 + \lambda h + \frac{1}{2}(\lambda h)^2$	nein	nein	$2,0/\lambda$
Runge-Kutta (4. Ordnung)	$1 + \lambda h + \frac{1}{2}(\lambda h)^2 + \frac{1}{6}(\lambda h)^3 + \frac{1}{24}(\lambda h)^4$	nein	nein	$2,78/\lambda$

Tabelle 3.2:

Q-Symbole und Stabilitätsmerkmale für verschiedene Differenzenverfahren

### 3.1.2.3 Fehlerkontrollrechnung und Zeitschrittsteuerung

Das Ziel einer Fehlerkontrollrechnung ist die Beschränkung des lokalen Abbruchfehlers  $\theta(\Theta, h)$  bzgl. einer vorgegebenen Norm, so daß

$$\varepsilon_{\min} \leq \|\boldsymbol{\theta}\| \leq \varepsilon_{\max}, \quad (3.23)$$

wobei  $\varepsilon_{\min}$  und  $\varepsilon_{\max}$  Intervallgrenzen sind. Die Definition des lokalen Abbruchfehlers wird z.B. bei *Lambert* (1983), *Butcher* (1987) oder *Burden et al.* (1981) beschrieben. Die Fehlerkontrollrechnung erfolgt in zwei Schritten:

(a) Fehlerabschätzung

Gegeben sei ein Verfahren der Ordnung  $n$

$$\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_{i+1} = \widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_i + h \widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_i \quad (3.24)$$

und ein Verfahren der Ordnung  $n+1$

$$\hat{\boldsymbol{\Theta}}_{i+1} = \hat{\boldsymbol{\Theta}}_i + h \hat{\boldsymbol{\Phi}}_i. \quad (3.25)$$

Mit

$$\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_i = \hat{\boldsymbol{\Theta}}_i \quad (3.26)$$

kann eine Fehlerabschätzung für  $\widetilde{\boldsymbol{\Theta}}_{i+1}$  nach

$$\|\boldsymbol{\theta}\| = h \|\widetilde{\boldsymbol{\Phi}}_i - \hat{\boldsymbol{\Phi}}_i\| \quad (3.27)$$

vorgenommen werden.

(b) Zeitschrittmodifizierung

Ist für einen Zeitschritt  $h_{(1)}$  nicht die Bedingung der Gl. (3.23) erfüllt, wird ein neuer Zeitschritt  $h_{(2)}$  mit der Annahme

$$\frac{\|\boldsymbol{\theta}_{(1)}\|}{h_{(1)}^{n+1}} = \frac{\varepsilon}{h_{(2)}^{n+1}} \quad (3.28)$$

nach

$$h_{(2)} = h_{(1)} \left( \frac{\varepsilon}{\|\boldsymbol{\theta}_{(1)}\|} \right)^{\frac{1}{n+1}} \quad (3.29)$$

bestimmt. Zu bemerken ist, daß die Annahme in Gl. (3.28) für  $\|\boldsymbol{\theta}\| \gg \varepsilon_{\max}$  eine sehr grobe Näherung darstellt und daher für einen Algorithmus zusätzliche Schranken, z. B.  $h_{(2)} > \alpha h_{(1)}$  mit  $\alpha = 0,1$  vorgeschlagen werden. Gegebenenfalls muß iterativ vorgegangen werden, um Gl. (3.23) zu erfüllen.

#### 3.1.2.4 Die zu lösenden Gleichungen für das Temperaturproblem

Bei Anwendung expliziter Verfahren sind keine nichtlinearen Gleichungssysteme zu lösen. Allerdings ist die Bestimmung des maximalen Eigenwertes notwendig, um einen numerisch stabilen Algorithmus zu erhalten. Iterative Verfahren zur Lösung dieses Problems werden z. B. bei *Marchuk* (1975) oder *Bathe* (1982) beschrieben. Sollen implizite Verfahren verwendet werden, ergeben sich nichtlineare Gleichungssysteme, deren Lösung z. B. mit dem BFGS-Verfahren erfolgen kann [siehe hierzu *Dennis/Moré* (1977)]. Auf die Anwendung des BFGS-Verfahrens in der FE-Methode wird insbesondere bei *Mathies/Strang* (1979) eingegangen.

### 3.1.3 Rechenbeispiele

#### 3.1.3.1 Beispiel zur Fehlerkontrollrechnung

Im ersten Beispiel betrachten wir einen Zylinder, der mit 3 rotationssymmetrischen Elementen diskretisiert ist. Die Ausgangstemperatur beträgt  $26^\circ\text{C}$ . Die Temperaturerhöhung zur Zeit  $t=0$  am rechten Rand sei  $50^\circ\text{C}$ . Für  $t>0$  ergibt sich somit in der Rotationsachse eine instationäre Temperaturverteilung, die gegen den stationären Wert von  $50^\circ\text{C}$  strebt.

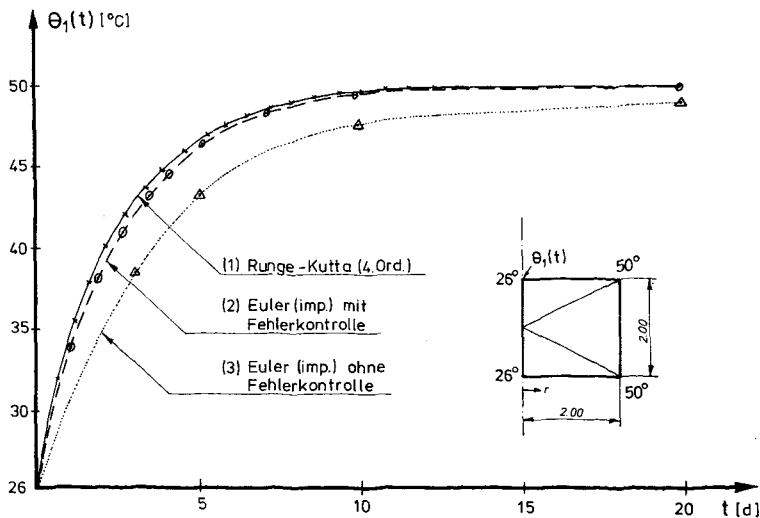


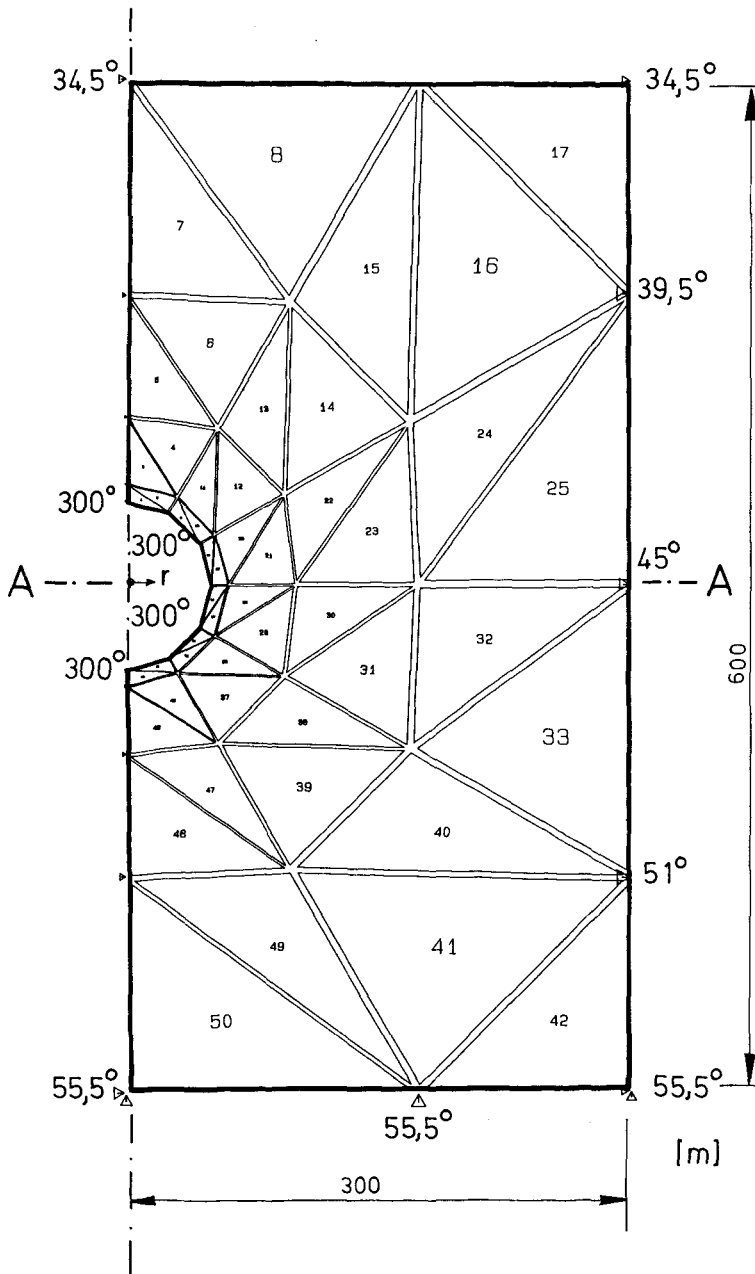
Bild 3.2:

Beispiel zur Fehlerkontrollrechnung

In Bild 3.2 werden die Rechenläufe für eine ausgewählte Temperatur in der Rotationsachse verglichen. Die Kurve (1) wurde nach dem Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung ermittelt. Da das Stabilitätskriterium relativ kleine Zeitschritte verlangte und die Ordnung des Differenzenverfahrens vergleichsweise hoch ist, können die Ergebnisse als relativ genau angesehen werden. Die Kurven (2) und (3) wurden mit einem Verfahren 1. Ordnung, dem Euler-Corrector-Verfahren, sowohl mit Fehlerkontrollrechnung und selbststeuernder Zeitinkrementierung, wobei die Trapez-Regel zur Fehlerabschätzung diente, als auch mit vorgegebenen, willkürlich gewählten Zeitschritten ermittelt. Der Fehler wurde in der Euklidischen Norm bestimmt. Die Toleranzgrenze wurde mit  $\varepsilon_{\max} = 1^\circ\text{C}$  vorgegeben. Man erkennt, daß die Kurve (2) nicht mehr als  $1^\circ\text{C}$  von der genaueren Kurve (1) abweicht, während die Kurve (3) weitaus größere Abweichungen zeigt.

#### 3.1.3.2 Kaverne mit konstanter Innentemperatur

Beispiel 2 behandelt die instationäre Temperaturverteilung in einer Kaverne infolge eines Temperatursprungs im Innern der Kaverne von  $45^\circ\text{C}$  auf  $300^\circ\text{C}$ . Der Innenradius



*Bild 3.3:*  
*Kaverne; Geometrie, Diskretisierung und Temperaturreandbedingungen*



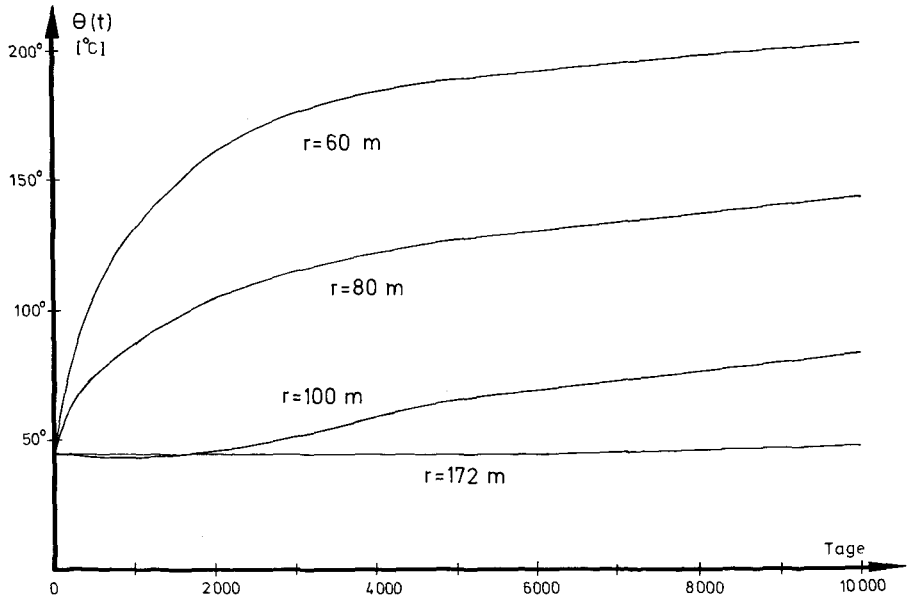


Bild 3.4a):  
Temperatur für verschiedene Radien  $r$  als Funktion der Zeit  $t$

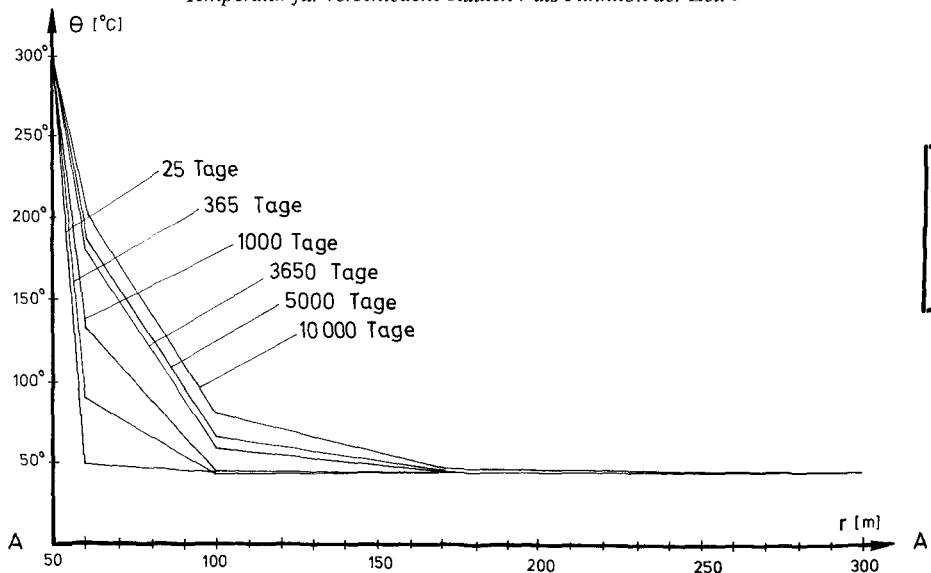


Bild 3.4b):  
Temperatur zu verschiedenen Zeiten  $t$  als Funktion vom Radius  $r$

Bild 3.4:  
Kaverne; instationäre Temperaturverteilung im Schnitt A–A

der Kaverne beträgt  $r = 50$  m. In Bild 3.3 sind die Geometrie, die Diskretisierung und die Temperaturrandbedingungen dargestellt. Die Stoffparameter  $\lambda$  und  $C_Q$  wurden nach den Gleichungen (2.48) und (2.49) ermittelt. Die instationäre Temperaturfeldberechnung erfolgte mit dem Euler-Corrector-Verfahren, wobei die Trapez-Regel zur Fehlerkontrollberechnung verwendet wurde. Dieses Vorgehen ergab für den Zeitraum von 10.000 Tagen 38 Zeitinkremente mit  $h_1 = 25$  Tage und  $h_{38} = 1000$  Tage. In Bild 3.4 ist die Temperaturverteilung im Schnitt A–A für verschiedene Zeitpunkte  $t > 0$  dargestellt. Die Tabelle 3.3 zeigt einige Ergebnisse, die sich aus der Fehlerkontrollrechnung ergaben. Angegeben werden die in der Eingabe vorgegebenen Zeitschritte und, falls der Fehler in der Euklidischen Norm größer als  $1^\circ\text{C}$  ist, die verbesserten Zeitschritte.

Zeitschritt i	$t_i$ [d]	$\bar{h}$ (vorg.) [d]	$\ l(\bar{h})\ _2$ [°C]	h aus FKR [d]	$\ l(h)\ _2$ [°C]
1	0	100	3,7	25	0,56
2	25	100	3,1	25	0,44
3	50	100	2,5	25	0,40
4	75	100	2,3	25	0,36
⋮					
36	7000	2000	2,2	1000	0,68
37	8000	1000	0,56	1000	0,56
38	9000	1000	0,46	1000	0,46

Tabelle 3.3:

Kaverne; Ergebnisse aus der Fehlerkontrollrechnung; vorgegebener und verbesserter Zeitschritt mit zugehörigen Fehlern

### 3.2 Das mechanische Kriechproblem

#### 3.2.1 Formulierung der Rand- und Anfangswertaufgabe

Es wird ein Gebiet  $\Omega$  im  $\mathbb{R}^3$  betrachtet. Ein Punkt in  $\Omega$  ist durch den Vektor  $\mathbf{x}$  beschrieben, und  $t$  kennzeichnet die Zeit. Folgende Gleichungen stehen zur Verfügung:

- Die Gleichgewichtsbedingung

$$\operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{f} = \mathbf{0}, \quad (3.30)$$

- die konstitutive Gleichung

$$\mathbf{T} = \mathbb{C} \mathbf{E}^{\text{el}}, \quad (3.31)$$

- die kinematischen Beziehungen

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\operatorname{grad} \mathbf{u} + (\operatorname{grad} \mathbf{u})^T), \quad (3.32)$$

wobei  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  das Verschiebungsfeld ist;

- die additive Zerlegung für die Verzerrungsgeschwindigkeiten

$$\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}^{\text{el}} + \dot{\mathbf{E}}^{\text{in}} + \dot{\mathbf{E}}^{\Theta}, \quad (3.33)$$

wobei  $\dot{\mathbf{E}}^{\Theta}$  die Verzerrungsgeschwindigkeiten infolge Temperatur sind;

- Stoffgesetze für die inelastischen Verzerrungsgeschwindigkeiten der Form

$$\dot{\mathbf{E}}^{\text{in}} = \Gamma(\mathbf{T}, \Theta, t) \mathbf{T}. \quad (3.34)$$

In Gl. (3.34) ist  $\Gamma$  ein Tensor, der von der Temperatur  $\Theta$ , den Spannungen  $\mathbf{T}$  und der Zeit  $t$  abhängt.

Das quasi-statische Rand-Anfangswertproblem besteht darin, ein Vektorfeld  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  und ein Tensorfeld  $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t)$  zu finden, so daß die Gleichungen (3.30)–(3.34) für alle  $\mathbf{x} \in \Omega$  und  $t \in [0, T]$ ,  $T > 0$  mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{g}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_1, \quad t \in [0, T] \\ \mathbf{T}(\mathbf{x}, t)\mathbf{n} &= \mathbf{h}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_2, \quad t \in [0, T] \end{aligned} \quad (3.35)$$

und den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = 0 \\ \mathbf{T}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{T}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

erfüllt sind. Hierbei sind  $\mathbf{u}_0$  und  $\mathbf{T}_0$  Anfangswerte zur Zeit  $t_0$ .  $\mathbf{g}$  und  $\mathbf{h}$  sind Randbedingungen.  $\mathbf{n}$  ist eine äußere Normale der Länge 1 entlang  $\partial\Omega_2$ , und  $\partial\Omega_1$  und  $\partial\Omega_2$  sind Teilgebiete des Randes  $\Omega$ , wobei  $\partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2 = \partial\Omega$  und  $\partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2 = \emptyset$  gilt. Die Gleichungen (3.35) und (3.36) müssen außerdem der Gleichgewichtsbedingung  $\text{div } \mathbf{T}_0 = \mathbf{f}_0$  für  $t = 0$  und den geometrischen Gleichungen genügen.

### 3.2.2 Finite-Element-Gleichungen

Grundlage der Finite-Element-Berechnungen bildet das Prinzip der virtuellen Arbeit. Es führt auf die „schwache“ Gleichgewichtsbedingung in Matrizenform

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega - \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad \forall t > 0. \quad (3.37)$$

Hierbei ist  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{x})$  eine Verzerrungs-Verschiebungsmatrix,  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$  der Spannungsvektor und  $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$  der Vektor der Knotenkräfte zur Zeit  $t$ . Ferner ist

$\mathbf{C} = \mathbf{C}(\mathbf{x})$  die Elastizitätsmatrix

$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} \, d\Omega$  die elastische Steifigkeitsmatrix

$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  der Vektor der Knotenverschiebung

$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t)$  der Vektor der Verzerrungen.

Die Zeitintegration unter Ausnutzung der Anfangsbedingungen in Gl. (3.36) geschieht

inkrementell durch Diskretisierung der Zeitachse  $t > 0$  in Zeitschritte  $h_{i+1} = t_{i+1} - t_i$ ,  $i = 0, \dots, I$  und führt auf die Gleichung

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}^T \Delta \boldsymbol{\sigma}_{i+1} d\Omega - \Delta \mathbf{F}_{i+1} = 0, \quad (3.38)$$

wobei  $\Delta \boldsymbol{\sigma}_{i+1} = \boldsymbol{\sigma}_{i+1} - \boldsymbol{\sigma}_i$  die Differenz zweier aufeinanderfolgender Spannungszustände im Zeitintervall  $h_{i+1}$  ist. Bei konstantem Elastizitätsmodul und der zu Gl. (3.33) äquivalenten Beziehungen für die Gesamtdehnungen

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i^{\text{el}} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i^{\text{in}} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i^{\Theta} \quad (3.39)$$

$$\text{ist} \quad \Delta \boldsymbol{\sigma}_i = \mathbf{C} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i^{\text{el}}. \quad (3.40)$$

Zur Lösung von Gl. (3.38) unter Verwendung von Gl. (3.39) stehen explizite und implizite Integrationsverfahren zur Verfügung.

### 3.2.3 Integration der inelastischen Verzerrungsgeschwindigkeiten

Gegeben sei ein Stoffgesetz der Form

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{in}} = \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\sigma}, \Theta, t) \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.41)$$

Das Verzerrungsinkrement  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}}$  kann dann in allgemeiner Form wie folgt approximiert werden

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}} = \int_t^{t+h} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{in}} dt \approx h \sum_{i=1}^{\ell} w_i \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{in}}(\zeta_i), \quad (3.42)$$

mit

$$\begin{aligned} \ell &= \text{Anzahl der Stützstellen} & \zeta_i &= \text{Stützstellen } 0 \leq \zeta \leq 1 \\ w_i &= \text{Wichtungsfaktoren } \left( \sum_{i=1}^{\ell} w_i = 1 \right) & \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^{\text{in}} &= \text{Funktionswerte an den Stützstellen} \\ & & h &= \text{Zeitinkrement.} \end{aligned}$$

Beispiele für Integrationsverfahren sind in Tabelle 3.4 aufgelistet.

	$\ell$	$w_i$	$\zeta_i$
Trapez-Regel	2	1/2; 1/2	0    1
Simpson-Regel	3	1/6; 2/3; 1/6	0; 1/2; 1
Euler-Predictor	1	1	0
Euler-Corrector	1	1	1
Zeta-Verfahren	1	1	$0 < \zeta < 1$
Gauß	2	1/2; 1/2	$(1-1/\sqrt{3})/2;$ $(1+1/\sqrt{3})/2$

Tabelle 3.4:  
Beispiele für Integrationsverfahren

Das Euler-Predictor-Verfahren ist ein explizites Verfahren, während die übrigen Verfahren implizit sind.

### 3.2.4 Explizite Integrationsverfahren

#### 3.2.4.1 Allgemeines

Allgemeine visko-plastische Algorithmen sind von *Corneau* (1975) behandelt worden. Es wird gezeigt, daß die Integration visko-plastischer Stoffgesetze äquivalent der Lösung eines Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung ist. Somit können z.B. Stabilitätskriterien, die im Rahmen der Theorie über gewöhnliche Differentialgleichungen bekannt sind, verwendet werden.

#### 3.2.4.2 Das Stabilitätskriterium

Da explizite Integrationsverfahren nicht A-stabil sind [siehe hierzu Tabelle (3.2) oder *Lambert* (1983)], darf ein kritischer Zeitschritt nicht überschritten werden, um einen numerisch stabilen Algorithmus zu erhalten. Von *Corneau* wird gezeigt, daß ein Stabilitätskriterium für explizite Verfahren im Rahmen einer FE-Methode unabhängig von der räumlichen Diskretisierung der Struktur angegeben werden kann, und somit lediglich eine lokale Untersuchung in den Integrationspunkten notwendig wird. Das Kriterium lautet wie folgt: Es seien die Elastizitätsmatrix **C** und

$$\mathbf{H} = \frac{\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{in}}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad (3.43)$$

die im Integrationspunkt lokal gegebenen Matrizen. Dann müssen, bei Anwendung des Euler-Predictor-Verfahrens, alle Eigenwerte  $\lambda^{\text{HC}}$  der Matrix **HC** der Bedingung

$$\max \lambda^{\text{HC}} < \frac{2}{h} \quad (3.44)$$

genügen. Wir beschränken uns zunächst exemplarisch auf isotropes Verhalten und auf Kriechgesetze der Form

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{in}} = \kappa \mathbf{F}^{\text{m}} \mathbf{s}, \quad (3.45)$$

womit ein großer Anteil der in Kapitel 2 angegebenen Gesetze beschrieben werden kann. In Gl. (3.45) ist

$$\kappa = \kappa(\Theta, t) \quad (3.46)$$

$$\mathbf{F} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{eff}} = \sqrt{3/2 \mathbf{s}^T \mathbf{s}} \quad (3.47)$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{D}_s \boldsymbol{\sigma} \quad (3.48)$$

$$\mathbf{D}_s = \mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \mathbf{1}^T, \quad (3.49)$$

wobei **s** der Deviator von **σ**, **D<sub>s</sub>** eine Projektionsmatrix, **I** eine Einheitsmatrix der Dimension  $k=6$  und  $\mathbf{1} = [1, 1, 1, 0, 0, 0]^T$  ist. Das Ergebnis für **H** lautet dann

$$\mathbf{H} = \kappa F^m \left( \mathbf{D}_s + \frac{3m}{2F^2} \mathbf{s} \mathbf{s}^T \right). \quad (3.50)$$

Für isotropes Verhalten lautet die Elastizitätsmatrix

$$\mathbf{C} = 2G \mathbf{I} + \lambda \mathbf{1} \mathbf{1}^T \quad (3.51)$$

mit der Lamé-Konstanten  $\lambda$  und dem Schubmodul  $G$ . Formuliert man das Problem in den Hauptspannungsrichtungen, dann brauchen nur  $k = 3$  Dimensionen berücksichtigt zu werden. Es kann leicht gezeigt werden, daß  $\mathbf{H}$  und  $\mathbf{C}$  die gleichen Eigenvektoren  $\mathbf{x}_1 = \mathbf{1}$ ,  $\mathbf{x}_2 = \mathbf{s}$  und  $\mathbf{x}_3 = \mathbf{1} \times \mathbf{s}$  haben. Der zu  $\mathbf{x}_2 = \mathbf{s}$  gehörige Eigenwert ist am größten und ergibt sich zu

$$\max \lambda^{HC} = (m+1) \kappa F^m 2G. \quad (3.52)$$

Damit ist der kritische Zeitschritt für einen numerisch stabilen Algorithmus

$$h_{kr} = \frac{1}{G \kappa (m+1) F^m}. \quad (3.53)$$

Für das Versetzungsmodell in der gekoppelten Form ergibt sich der kritische Zeitschritt analog zu Gl. (3.53) als

$$h_{kr} = \frac{1}{G (\kappa_1(m+1) F^m - \kappa_2 m F^{m-1})}, \quad (3.54)$$

wobei  $\kappa_1 = 3/2 K_1$  und  $\kappa_2 = 3/2 K_1 K_0 \mu$  ist.

### 3.2.4.3 Runge-Kutta-Verfahren

Das Euler-Predictor-Verfahren ist ein Verfahren 1. Ordnung. Fassen wir als Folge von Gl. (3.31)

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\sigma}} &= \mathbf{C} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{el}} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\sigma}, t) \\ \text{mit } \boldsymbol{\sigma}_0 &= \boldsymbol{\sigma}(t=0) \end{aligned} \quad (3.55)$$

als die lokal zu lösende Differentialgleichung mit Anfangsbedingungen auf, kann ein Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung wie folgt angewendet werden [siehe hierzu *Butcher* (1987)]

$$\boldsymbol{\sigma}_{i+1} = \boldsymbol{\sigma}_i + \frac{h}{2} \left( \mathbf{f}(\boldsymbol{\sigma}_i, t_i) + \mathbf{f}(\boldsymbol{\sigma}_i + h \mathbf{f}(\boldsymbol{\sigma}_i, t_i), t_{i+1}) \right). \quad (3.56)$$

Die Stabilitätsgrenze  $h_{kr}$  ist dieselbe wie beim Euler-Predictor-Verfahren (siehe Tabelle 3.2).

### 3.2.5 Implizite Integrationsverfahren

#### 3.2.5.1 Allgemeines

Bei hohen Spannungen (ca. 50–100 MPa) und hohen Temperaturen (ca. 100–300°C) haben die expliziten Integrationsverfahren den Nachteil, daß das Stabilitätskriterium

sehr kleine Zeitschritte verlangt. Werden dagegen Verfahren verwendet, die A-stabil sind, können weitaus größere Zeitschritte benutzt werden. Diese Verfahren sind jedoch immer implizit [siehe hierzu Tabelle 3.2 oder *Lambert* (1983)], so daß zusätzlich nicht-lineare Gleichungssysteme sowohl lokal als auch global gelöst werden müssen.

### 3.2.5.2 Die lokale Iteration

Die lokale Iteration wird in den Integrationspunkten (Gaußpunkten) des Gebietes  $\Omega$  vorgenommen. Hierbei erfolgt ein Update der zeitabhängigen Spannungs- und Verzerrungszinkremente  $(.)_{i+1}^{(j+1)}$ . Grundlage der lokalen Iteration sind:

- a) Ein inkrementelles Verschiebungsfeld  $\Delta \mathbf{u}_{i+1}^{(j+1)}$  ist vorgegeben.
- b) Die Gesamtverzerrungen werden additiv zerlegt.
- c) Ein Update der Inkremente  $(.)_{i+1}^{(j+1)}$  wird bezogen auf den Zustand  $(.)_i$ , d.h. einen konvergierten Gleichgewichtszustand, und nicht auf den Zustand  $(.)_{i+1}^{(j)}$ , der kein Gleichgewichtszustand ist [siehe hierzu *Simo/Taylor* (1985)].

#### Formulierung der Nullstellenaufgabe

Gegeben seien ein Verzerrungszinkrement  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}$  aus der globalen Iteration und ein  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^\Theta$  aus der Temperaturberechnung. Gesucht sind dann  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}}$ ,  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}}$  und  $\Delta \boldsymbol{\sigma}$ , so daß die folgenden Gleichungen erfüllt sind:

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^\Theta + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}} \quad (3.57)$$

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = h \sum_{j=1}^{\ell} w_j \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_j^{\text{in}} \quad (3.58)$$

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} = \mathbf{C}^{-1} \Delta \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.59)$$

Bei vorgegebener Temperaturverteilung kann dann ein Residuum wie folgt definiert werden

$$\mathbf{r}(\Delta \boldsymbol{\sigma}) = \Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^\Theta - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{el}} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}}. \quad (3.60)$$

Die zu lösende Nullstellenaufgabe lautet daher: Suche  $\Delta \boldsymbol{\sigma}$ , so daß gilt

$$\mathbf{r}(\Delta \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{0}. \quad (3.61)$$

#### Lösung der Nullstellenaufgabe

Gl. (3.61) wird iterativ mit einem Abstiegsverfahren der Form

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}_{(k+1)} = \Delta \boldsymbol{\sigma}_{(k)} - \alpha_{(k)} \mathbf{H}_{(k)}^{-1} \mathbf{r}_{(k)} \quad (3.62)$$

gelöst. Hierbei ist  $\alpha_{(k)}$  eine Schrittweite, die in einem Line-Search bestimmt wird, und  $\mathbf{H}_{(k)}$  ist eine positiv-definite Matrix, wobei nur die BFGS-Matrix [*Mathies/Strang* (1979)] oder die Newton-Matrix als effektiv genug anzusehen sind. Der Algorithmus zur Lösung von Gl. (3.61) lautet:

## Algorithmus zur lokalen Iteration

- (0) Setze  $k=0$  und  $\Delta\sigma_{(k)} = \mathbf{0}$   
Bestimme  $\mathbf{r}_{(0)}$  nach Gleichung (3.60)
- (1) Iterationsmatrix  $\mathbf{H}_{(k)}$  (Newton- oder BFGS-Verfahren)
- (2) Suchrichtung:  $\mathbf{d}_{(k)} = \mathbf{H}_{(k)}^{-1} \mathbf{r}_{(k)}$
- (3) Line-Search:  
Bestimme  $\alpha_{(k)}$  und  $\mathbf{r}_{(k+1)}$ , so daß  $\mathbf{d}_{(k)}^T \cdot \mathbf{r}_{(k+1)} < \varepsilon$ ,  
wobei  $\varepsilon = \text{To } \ell \mathbf{d}_{(k)}^T \cdot \mathbf{r}_{(k)}$  und  $\text{To } \ell \in (0,1]$
- (4) Spannungszuwachs  $\Delta\sigma_{(k+1)} = \Delta\sigma_{(k)} - \alpha_{(k)} \mathbf{d}_{(k)}$
- (5) Wenn  $\|\mathbf{d}\| < \text{To } \ell 1$  und  $\|\mathbf{r}_{(k+1)}\| < \text{To } \ell 2$ , dann STOP;  
sonst setze  $k = k + 1$  und gehe zu (1).

## 3.2.5.3 Die Newton-Matrix für die lokale Iteration

Die Newton-Matrix oder Jacobi-Matrix, d.h. die Ableitung des Residuums in Gl. (3.61) nach den Spannungen  $\Delta\sigma$  ist wie folgt definiert:

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \Delta \sigma}. \quad (3.63)$$

Da  $\Delta\varepsilon$  und  $\Delta\varepsilon^\theta$  in der lokalen Iteration nicht von  $\Delta\sigma$  abhängig sind, folgt

$$\mathbf{K} = -\mathbf{C}^{-1} - h \sum_{j=1}^{\ell} w_j \mathbf{H}_j, \quad (3.64)$$

wobei

$$\mathbf{H}_j = \frac{\partial \dot{\varepsilon}_j^{\text{in}}}{\partial \Delta \sigma}. \quad (3.65)$$

Bei Beschränkung auf Stoffgesetze von der Form der Gl. (3.45) lautet das Ergebnis

$$\mathbf{H}_j = \zeta_j \kappa_j F_j^m \left( \mathbf{D}_s + \frac{3m}{2F_j^2} \mathbf{s}_j \mathbf{s}_j^T \right). \quad (3.66)$$

Die Matrix  $\mathbf{D}_s$  ist in Gl. (3.49) definiert.

## 3.2.6 Integration mit Subinkrementen und lokaler Fehlerkontrollrechnung

## 3.2.6.1 Allgemeines

Im Hinblick auf Kriechberechnungen mit großen Zeiträumen ist ein Algorithmus mit relativ großen Zeitschritten  $h$  erstrebenswert. Ist einmal ein Zeitschritt gewählt, soll dieser in jedem Integrationspunkt angewendet werden. Allerdings kann sich während der globalen Iteration herausstellen, daß die Integration, wie sie in den vorherigen Abschnitten beschrieben worden ist, in einigen Integrationspunkten zu ungenau wird. Um jetzt nicht die gesamte globale Iteration mit einem kleineren Zeitschritt beginnen



zu müssen, wird auf lokaler Ebene eine Integration mit Subinkrementen  $\Delta h$  ausgeführt. Es sei darauf hingewiesen, daß die Integration mit Subinkrementen sowohl explizit als auch implizit erfolgen kann.

### 3.2.6.2 Vorgehen zur Subinkrementierung

Der Grundgedanke basiert auf Berechnungen mit Subinkrementen, wie sie z.B. von *Owen/Hinton* (1980) zur Integration plastischer Stoffgesetze angewendet werden. Der Zeitschritt  $h$  wird in  $N$  gleich große Subzeitschritte

$$\Delta h_j = \frac{1}{N} h, \quad j=1, \dots, N \quad (3.67)$$

unterteilt. Zur Bestimmung von  $N$  wird eine lokale Fehlerkontrollrechnung ausgeführt. Außerdem wird angenommen, daß

$$\Delta \Delta \epsilon_j = \frac{1}{N} \Delta \epsilon \quad (3.68)$$

gilt. Die Anfangsspannungen eines jeden Subinkrementes  $j+1$  sind die Endspannungen des vorherigen Subinkrementes  $j$ , also

$$\sigma_{i+j+1} = \sigma_{i+j} + \Delta \Delta \sigma_j. \quad (3.69)$$

### 3.2.6.3 Lokale Fehlerkontrollrechnung

Zur Abschätzung des lokalen Abbruchfehlers eines Verfahrens der Ordnung  $n$  wird ein Verfahren der Ordnung  $n+1$  herangezogen (vgl. Abschnitt 3.1.2.3). Soll die lokale Iteration z. B. explizit mit dem Euler-Predictor-Verfahren 1. Ordnung nach

$$\sigma_{i+1} = \sigma_i + h \dot{\sigma}_i \quad (3.70)$$

erfolgen, so läßt sich nach *Butcher* (1987) mit dem Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung [Gl. (3.56)] ein Fehler wie folgt abschätzen

$$l(\sigma, h) = \frac{h}{2} \left( f(\sigma_i, t_i) + f(\sigma_i + h f(\sigma_i, t_i), t_{i+1}) \right). \quad (3.71)$$

Für konstanten E-Modul folgt somit

$$l(\sigma, h) = \frac{h}{2} C (\dot{\epsilon}_i^{\text{in}} - \dot{\epsilon}_{i+1}^{\text{in}}). \quad (3.72)$$

Ist eine Toleranzgrenze  $\epsilon_{\max}$  von  $\|l\|$  überschritten, dann wird  $\Delta h_j$  nach der Gleichung

$$\Delta h_j = h \sqrt{\frac{\epsilon_{\max}}{\|l\|}} \quad (3.73)$$

ermittelt. Zu bemerken ist, daß für  $\|l\| \gg \epsilon_{\max}$  Gl. (3.73) ein zu kleines  $\Delta h_j$  ergeben kann und somit die Anzahl der Subinkremente zu groß wird. Gegebenenfalls muß iterativ vorgegangen werden bis

$$\varepsilon_{\min} < ||\mathbf{I}|| < \varepsilon_{\max} \quad (3.74)$$

erfüllt ist. Die Anzahl der Subinkremente ergibt sich letztlich zu

$$N = \frac{\Delta h}{h}. \quad (3.75)$$

### 3.2.7 Die globale Iteration

#### 3.2.7.1 Die Nullstellenaufgabe

Im Rahmen einer Verschiebungsmethode wird ausgehend von Gleichung (3.38) ein Residuum in jedem Zeitschritt  $h_i$  wie folgt definiert

$$\Psi(\Delta \mathbf{U}_i) = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \Delta \boldsymbol{\sigma}_i d\Omega - \Delta \mathbf{F}_i. \quad (3.76)$$

Die Nullstellenaufgabe zur Lösung von Gleichung (3.76) lautet somit: Suche  $\Delta \mathbf{U}_i$ , so daß

$$\Psi(\Delta \mathbf{U}_i) = \mathbf{0}. \quad (3.77)$$

#### 3.2.7.2 Lösungsverfahren für nichtlineare Gleichungssysteme

Zur Lösung von Gleichung (3.77) verwenden wir ein Abstiegsverfahren der Form

$$\Delta \mathbf{U}^{(j+1)} = \Delta \mathbf{U}^{(j)} - \alpha^{(j)} \mathbf{H}^{(j)-1} \Psi^{(j)}. \quad (3.78)$$

Hierbei ist  $\alpha^{(j)}$  eine im  $j$ -ten Schritt zu bestimmende Schrittweite, die in einem Line-Search berechnet wird. In der Regel ist dieses beim BFGS-Verfahren erforderlich, um eine positiv-definite Update-Matrix zu erhalten [siehe hierzu *Dennis/Moré (1977)*], während beim Newton-Verfahren  $\alpha = 1$  gesetzt werden kann.  $\mathbf{H}^{(j)}$  kennzeichnet die Iterationsmatrix, wobei z. B. Newton-, Modifizierte-Newton- oder Quasi-Newton-Verfahren zur Verfügung stehen [siehe *Mathies/Strang (1979)*].

#### 3.2.7.3 Das Newton-Verfahren mit konsistenter Tangente

Zum Erreichen quadratischer Konvergenz zur Lösung von Gleichung (3.77) muß  $\mathbf{H}^{(j)}$  gleich der Jacobi-Matrix

$$\mathbf{K}_T^{(j)} = \frac{\partial \Psi^{(j)}}{\partial \Delta \mathbf{U}^{(j)}} \quad (3.79)$$

sein. Zu beachten ist hierbei, daß in Gleichung (3.76)  $\Delta \boldsymbol{\sigma}_i$  abhängig von einem gewählten Integrationsverfahren in der lokalen Iteration ist, und somit auch  $\mathbf{K}_T$  hiervon abhängig wird. Damit verbunden ist der Begriff der konsistenten Tangente, der im Zusammenhang mit Projektionsverfahren eingeführt wurde [*Simo/Taylor (1985)*, *Gruttmann/Stein (1987)*]. Im Falle der Euler-Corrector-Integration, bei konstantem E-Modul und für Kriechgesetze der Form

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{in}} = \kappa \mathbf{F}^{\text{m}} \mathbf{s}, \quad (3.80)$$

lautet das Ergebnis für die konsistente Tangente

$$\mathbf{K}_T = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \hat{\mathbf{C}} \mathbf{B} d\Omega, \quad (3.81)$$

mit

$$\hat{\mathbf{C}} = \dot{\mathbf{C}} \left( \mathbf{I} - \frac{3 \alpha m}{2 F_{i+1}^2 (1 + \alpha + \alpha m)} \mathbf{s}_{i+1} \mathbf{s}_{i+1}^T \right). \quad (3.82)$$

Hierbei ist

$$\dot{\mathbf{C}} = \left( \mathbf{I} - \frac{\alpha}{1 + \alpha} \mathbf{D}_s \right) \mathbf{C} \quad (3.83)$$

und

$$\alpha = 2 G \kappa h F_{i+1}^{\text{m}}. \quad (3.84)$$

$\mathbf{s}_{i+1}$  ist der Deviator von  $\boldsymbol{\sigma}_{i+1}$  zur Zeit  $t_{i+1}$ .

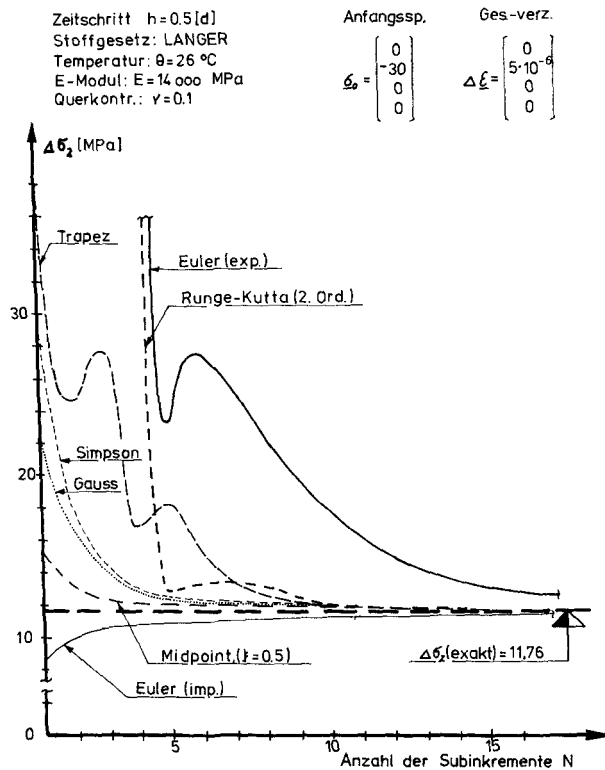


Bild 3.5:

Konvergenzverhalten der Integrationsverfahren in der lokalen Integration mit Subinkrementen

### 3.2.8 Rechenbeispiele

#### 3.2.8.1 Beispiel zur lokalen Integration mit Subinkrementen

In Bild (3.5) wird das Konvergenzverhalten verschiedener Integrationsverfahren in der lokalen Integration anhand einer Darstellung der  $\Delta\sigma_z$ -Komponente verglichen. Als Stoffgesetz wurde das Langer-Modell mit Primär- und Sekundäranteilen verwendet. Es wurden folgende Zahlenwerte, wie sie in einer lokalen Iteration auftreten können, gewählt: für den Zeitschritt  $h = 0,5$  Tage, die z-Komponente des Vektors der Anfangsspannungen  $\sigma_z = 30$  MPa, die z-Komponente des Vektors der Verzerrungsinkremente  $\Delta\varepsilon_z = 5 \cdot 10^{-6}$ , die Temperatur  $\Theta = 26^\circ\text{C}$ , den Elastizitätsmodul  $E = 14.000$  MPa und die Querkontraktionszahl  $\nu = 0,1$ .

Man erkennt, daß alle Verfahren gegen denselben Wert konvergieren. Die expliziten Verfahren erreichen eine Stabilitätsgrenze erst ab  $N > 4$ , wobei dann das Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung erheblich genauer wird als das Euler-Predictor-Verfahren. Die Simpson-Regel und die Trapez-Regel sind für kleine  $N$  relativ ungenau, da die Integration mit  $t = 0$  beginnt und der Primärkriechbereich mit berücksichtigt werden sollte. Auffallend sind ferner die für die Trapez-Regel typischen Oszillationen. Das Zeta-Verfahren für  $\xi = 0,5$  (Midpoint-Regel) konvergiert für das gewählte Beispiel am schnellsten.

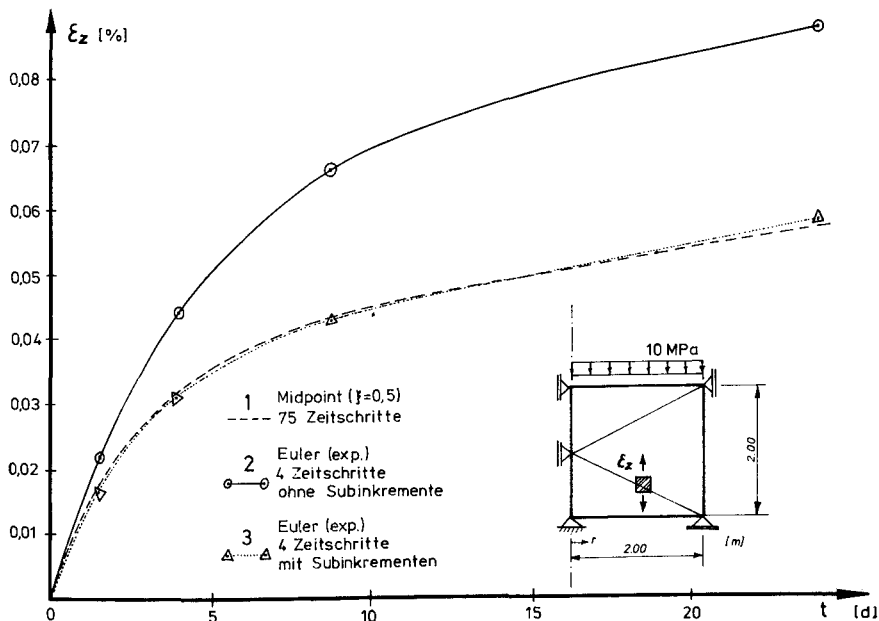


Bild 3.6:

Beispiel zur Anwendung von Subinkrementen mit lokaler Fehlerkontrollrechnung

## 3.2.8.2 Beispiel zur Fehlerkontrollrechnung

Im 2. Beispiel wird ein Zylinder untersucht, der mit 3 rotationssymmetrischen Elementen diskretisiert ist. Als Stoffgesetz wurde das Langer'sche Modell mit Primärkriechbereich verwendet. Der Zeitraum betrug 25 Tage und die Temperatur wurde konstant auf 26°C gehalten.

Im Bild 3.6 werden die Ergebnisse für eine ausgewählte Verzerrung von 3 verschiedenen Rechenläufen verglichen. Die Kurve 1 ergab sich mit der Midpoint-Regel, einer impliziten Integration mit 75 Zeitschritten und kann daher als relativ genau angesehen werden. Die Kurve 2 ist das Ergebnis einer expliziten Integration, wobei die Zeitschritte lediglich nach dem Stabilitätskriterium Gleichung (3.53) bestimmt wurden. Es wird deutlich, daß diese Kurve, obwohl numerisch stabil, erheblich von der genaueren Kurve 1 abweicht. Im 3. Versuch wurden dieselben Zeitschritte für eine explizite Integration vorgegeben, allerdings erfolgte diese mit einer Fehlerkontrollrechnung und Subinkrementierung. Man erkennt, daß dieses Vorgehen eine erhebliche Integrationsverbesserung bringt.

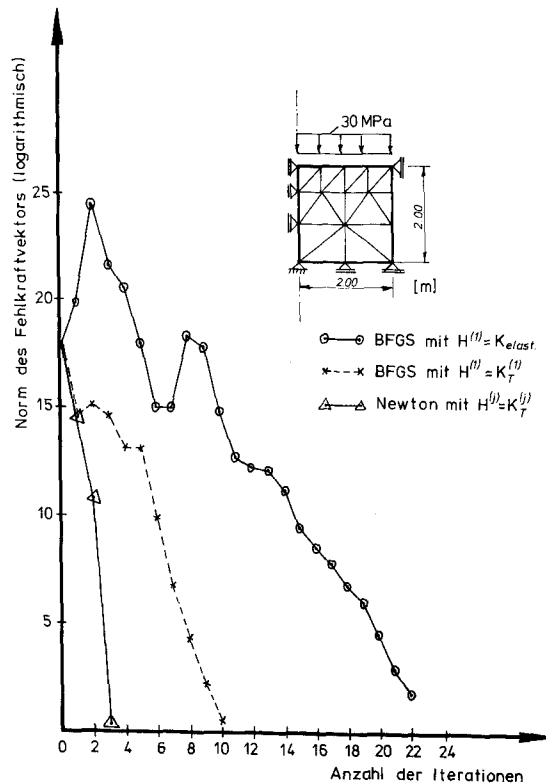


Bild 3.7:  
Konvergenzverhalten von BFGS- und Newton-Verfahren im 1. Zeitschritt

### 3.2.8.3 Beispiel zur konsistenten Tangente

Im 3. Beispiel untersuchen wir einen rotationssymmetrischen Zylinder mit 18 Elementen unter Axiallast. Es wurde nur der Sekundärkriechbereich nach dem Langer'schen Modell in 4 Zeitschritten von  $h_1 = 10$ ,  $h_2 = 40$ ,  $h_3 = 50$ ,  $h_4 = 100$  Tagen berücksichtigt. In Bild (3.7) wird für den ersten Zeitschritt das Konvergenzverhalten des Newton-Verfahrens mit dem des BFGS-Verfahrens, und zwar sowohl der elastischen Steifigkeitsmatrix als auch der konsistenten Tangente als Startmatrix, verglichen. Deutlich wird hierbei der Vorteil des Newton-Verfahrens mit konsistenter Tangente.

In Tabelle 3.5 sind zusätzliche Ergebnisse bezüglich der Anzahl der Iterationen und der verbrauchten Rechenzeiten angegeben. Im zweiten Zeitschritt erreichte das einfache BFGS-Verfahren nach 30 Schritten noch keine Konvergenz, während das Newton-Verfahren hier nur 6 Schritte benötigte. Es wird deutlich, daß mit größerem Zeitschritt der Aufwand zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems bei den BFGS-Algorithmen ansteigt, während dieses beim Newton-Verfahren nicht der Fall ist. In den letzten beiden Spalten sind in der ersten Zeile die Anzahl der Zeitschritte und die CPU-Zeit für die Kriechberechnung mit einem expliziten Algorithmus bis  $t = 10$  Tage angegeben. Da sich die Zeitschritte ( $0,243 < h_1 < 0,265$ ) bis hierhin nicht erheblich voneinander unterscheiden, schien es vertretbar, die Anzahl der Zeitschritte und die CPU-Zeit für die folgenden 3 Zeilen aufgrund der Werte der ersten Zeile abzuschätzen, um eine Größenordnung für die Konvergenzgeschwindigkeit eines expliziten Algorithmus zu bekommen. Vergleicht man somit die 4 Algorithmen, dann ist für das gewählte Beispiel die implizite Berechnung mit einem Newton-Verfahren mit konsistenter Tangente bezüglich der Konvergenzgeschwindigkeit am effektivsten.

Zeitinkrement [d]	Anzahl der Iterationen			CPU-Zeit			Euler (exp.)	
	Newton	BFGS (1)	BFGS (2)	Newton	BFGS (1)	BFGS (2)	Zeitschritte	CPU
10	6	22	11	5.600	18.000	9.400	38	9.900
40	6	(keine Konvergenz nach 30 Iterationen)	19	5.600	(keine Konvergenz nach 30 Iterationen)	13.000	152*	39.600*
50	7		24	6.400		16.000	190*	49.500*
100	7		> 30	6.400		—	380*	99.000*

Tabelle 3.5:

Verbrauchte Rechenzeiten und Anzahl der Iterationsschritte für Newton- und BFGS-Verfahren und einen expliziten Algorithmus (\* geschätzte Werte)

## 4. Kriechberechnung einer Modellkaverne

In Bild 4.1 ist eine Kaverne dargestellt, bei der eine Temperaturerhöhung im Innern der Kaverne auf  $100^\circ\text{C}$  stattfindet und die außerdem eine Axialbelastung sowie einen Seitendruck erfährt. Die räumliche Diskretisierung der Struktur ist bereits im Abschnitt 3.1.3.2, Bild 3.3 beschrieben.

Die Berechnung erfolgte mit dem Versetzungsmodell, wobei die Parameterbestimmung mit dem Langer'schen Modell, wie es in Abschnitt 2.3 beschrieben ist, durchgeführt wurde. Die Stoffparameter  $\lambda$ ,  $C_0$  und  $\alpha_0$  wurden nach den Gleichungen (2.48)

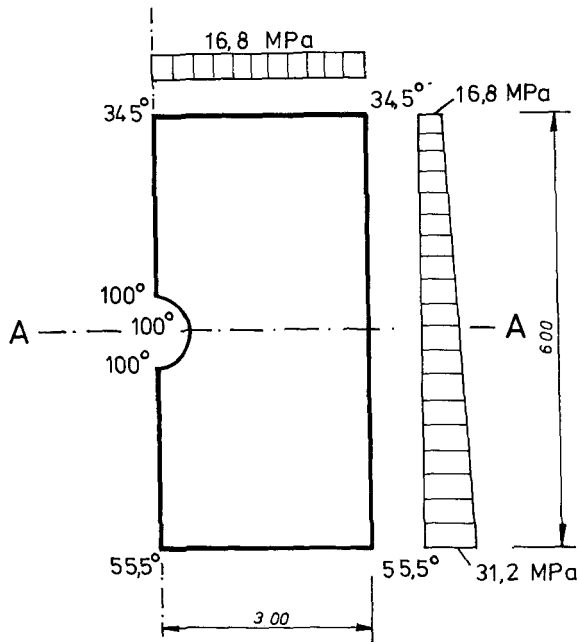


Bild 4.1:  
Kaverne; Temperaturrandbedingung und Belastung

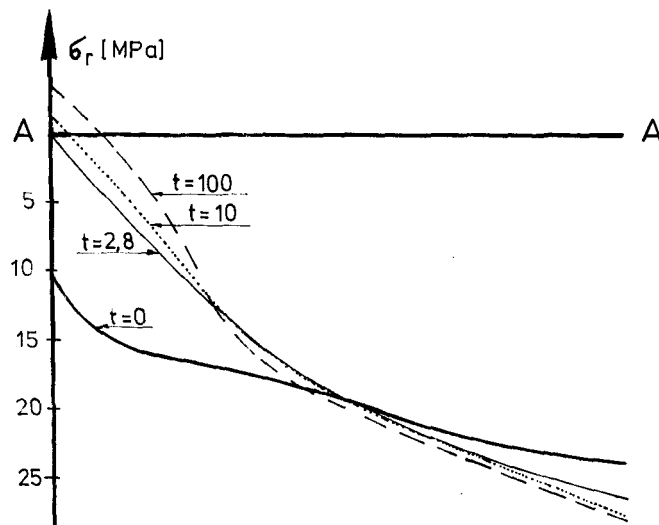


Bild 4.2:  
Kaverne; Spannungsverteilung  $\sigma_r$  im Schnitt A-A

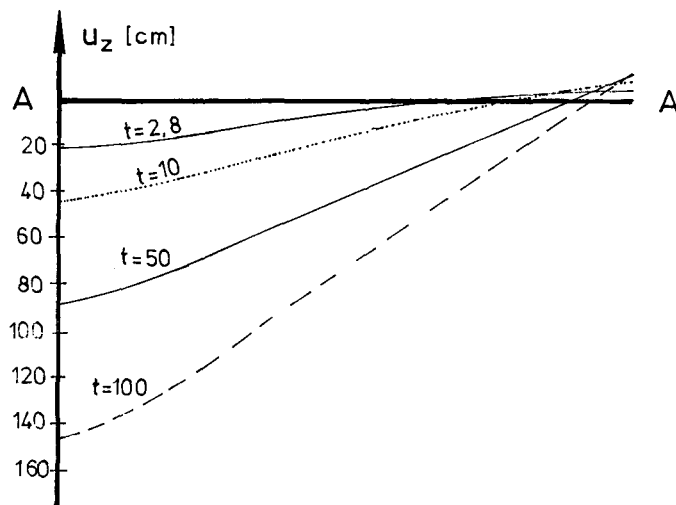


Bild 4.3:  
Kaverne; Verschiebung  $u_z$  im Schnitt A-A

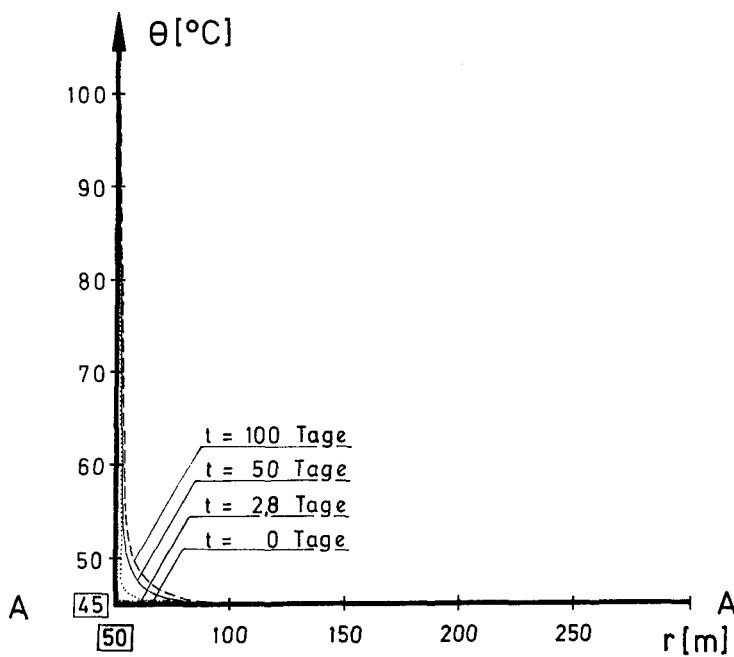


Bild 4.4:  
Kaverne; Temperatur  $\Theta$  im Schnitt A-A



bis (2.50) ermittelt. Der Elastizitätsmodul wurde mit  $E = 30.000 \text{ MPa}$  und die Querkontraktionszahl mit  $\nu = 0,3$  angenommen. Der Zeitraum betrug  $t = 100$  Tage. Die instationäre Temperaturverteilung wurde mit dem Euler-Corrector-Verfahren mit der Trapez-Regel zur Fehlerkontrollrechnung durchgeführt. Die Kriechberechnung erfolgte mit einer expliziten Euler-Predictor-Integration bis zur Zeit  $t = 26$  Tage und anschließender Euler-Corrector-Integration, wobei das Newton-Verfahren mit konsistenter Tangente zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems verwendet wurde.

In den Bildern 4.2 bis 4.4 sind die Radialspannung  $\sigma_r$ , die Verschiebung  $u_z$ , sowie die Temperatur  $\Theta$  in der Achse A–A für verschiedene Zeitpunkte  $t$  dargestellt.

## 5. Zusammenfassung

In Anbetracht der hohen Sicherheitsanforderungen an unterirdische Bauwerke im Steinsalz im Rahmen der Endlagerung umweltfeindlicher Abfallprodukte werden für den rechnerischen Nachweis der Standsicherheit der Hohlräume und der Integrität des Salzstockes zuverlässige Materialgleichungen benötigt. Diese Gleichungen müssen in der Lage sein, mit einer möglichst geringen Anzahl von Parametern, die aus den Ergebnissen von Kriechversuchen mit einer Dauer von nur einigen Monaten oder Jahren bestimmt werden, das Deformationsverhalten des die Hohlräume umgebenden Salzes auch über Zeiträume von zehntausenden von Jahren richtig vorherzusagen.

Zur Beschreibung des thermo-mechanischen Kriechens von Steinsalz ist eine Reihe von Stoffgesetzen entwickelt worden, die alle mehr oder weniger gut geeignet sind, Kriechen zu beschreiben. In Kapitel 2 wird ein kurzer Überblick über Stoffgesetze für Steinsalz gegeben. Dehnungs- und Zeitverfestigungsgesetze können nur das Übergangskriechen beschreiben, da sie von einer fortwährenden Verfestigung des Materials ausgehen. Mit nichtlinearen rheologischen Gesetzen ist man grundsätzlich in der Lage, alle auftretenden Kriecheffekte durch sog. rheologische Modellkörper zu simulieren. Unter allen empirischen und halbempirischen Materialbeschreibungen sind die strukturrheologischen Stoffgesetze, wie z.B. die von *Langer/Hunsche* oder *Munson/Dawson*<sup>3)</sup>, am geeignetsten, das komplexe Kriechverhalten von Steinsalz wirklichkeitsnah zu beschreiben.

Für die Extrapolation von Versuchsergebnissen auf lange Zeiträume oder auf Kriechbereiche, die Versuchen unzugänglich sind, muß sichergestellt sein, daß die extrapolierten Ergebnisse die wirklichen Kriechdeformationen möglichst gut approximieren. Hierfür bieten sich die thermodynamisch konsistenten Stoffgesetze an, deren Grundlage die Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik sind. Bei der Konstruktion solcher Stoffgesetze sollte auf die Deformationsmechanismen Bezug genommen werden. Das kann durch Anwendung der Theorie der inneren Variablen wie z.B. beim „Versetzungsmodell“ geschehen. Es wäre jedoch wünschenswert, daß die in dem Stoffgesetz enthaltenen Parameter mit meßbaren inneren Größen zu identifizieren sind.

<sup>3)</sup> Das Gesetz von *Munson/Dawson* wurde in der vorliegenden Arbeit nicht behandelt.

Das an unserem Institut entwickelte „Versetzungsmodell“ setzt sich aus den Bilanzgleichungen, der gekoppelten instationären Wärmeleitungsgleichung, weiteren thermischen Gleichungen, dem Elastizitätsgesetz sowie einem gekoppelten Differentialgleichungssystem für die Kriechgeschwindigkeit und die zeitliche Entwicklung der inneren Variablen zusammen. Unter der Voraussetzung zeitlich konstanter Spannung und Temperatur kann das Differentialgleichungssystem entkoppelt werden. Anhand von Parameterstudien und Sensibilitätsanalysen werden verschiedene Stoffgesetze miteinander verglichen. Hierbei zeigen sich die Parameter des „Versetzungsmodells“ verhältnismäßig unempfindlich. Die durch eine kleine Parameteränderung hervorgerufene Abweichung einer Kriechkurve bleibt immer innerhalb der Größenordnung der Änderung selbst, während bei anderen Stoffgesetzen teilweise erhebliche Vergrößerungen der Fehler zu beobachten sind, die sich zum Teil im Laufe der Zeit noch vergrößern. Das „Versetzungsmodell“ ist damit grundsätzlich in der Lage, thermo-mechanische Kriechvorgänge im Steinsalz gut zu approximieren.

Bei der numerischen Behandlung des thermo-mechanischen Kriechproblems wurden insbesondere unterschiedliche Differenzenverfahren für die Zeitintegration, sowohl expliziter als auch impliziter Art untersucht.

Bei expliziten Verfahren steht dem Vorteil, daß keine nichtlinearen Gleichungssysteme zu lösen sind, als Nachteil gegenüber, daß, da sie nicht A-stabil sind, eine Eigenwertanalyse zur Bestimmung des betragsmäßig größten Eigenwertes und somit des kritischen Zeitschrittes notwendig ist. Während beim Temperaturteil dieser Eigenwert iterativ für das globale Gleichungssystem ermittelt wird, kann bei der Kriechberechnung Stabilität für das globale System durch eine lokale Untersuchung in den Integrationspunkten der räumlichen Integration gesichert werden. Insbesondere lassen sich hierbei für eine bestimmte Klasse von Kriechgesetzen (*Langer, Thoms/Char*, „Versetzungsmodell“ oder Modell der inneren Variablen von *Olschewski*) analytische Lösungen finden, so daß ein iteratives Vorgehen vermieden wird.

Bei den A-stabilen impliziten Verfahren können in der Regel weitaus größere Zeitschritte als bei den expliziten Methoden verwendet werden, jedoch sind nichtlineare Gleichungssysteme zu lösen, wofür z.B. BFGS-Verfahren zur Verfügung stehen. Für die Kriechberechnung konnte im Rahmen eines Newton-Verfahrens durch eine mit dem Residuum konsistent abgeleitete Iterationsmatrix eine erhebliche Konvergenzbeschleunigung erreicht werden.

Vergleicht man die Ergebnisse verschiedener Differenzenverfahren bei gleichem Zeitschritt miteinander, können die Ergebnisse trotz Stabilität erheblich voneinander abweichen. Daher erscheint eine Fehlerkontrollrechnung mittels einer Fehlerabschätzung und ggf. erneuter Integration bei verbessertem Zeitschritt unumgänglich.

Bei Kriechberechnungen konnte mit Hilfe von Subinkrementen und lokaler Fehlerkontrollrechnung eine erhebliche Integrationsverbesserung erreicht werden.

Die hier vorgelegte Arbeit stellt Ergebnisse des durch den Bundesminister für Forschung und Technologie (BMFT) geförderten Forschungsvorhabens „Stoffgleichungen für Steinsalze unter mechanischer und thermischer Beanspruchung einschließ-

lich der Behandlung von Randwertproblemen nach der Finite-Element-Methode“ vor. Unser Dank gilt dem BMFT für die großzügige Förderung und der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) Hannover, hier besonders Herrn Prof. Dr. M. Langer und Herrn Dr. U. Hunsche für die fruchtbare Zusammenarbeit.

## Literatur

### Literatur zu Kapitel 1:

- Albrecht, H.* (1980): Eignung von Salzstöcken zur Endlagerung. Technische Mitt. **73**, 8, Essen, S. 639–642.
- Bornemann, O.; Liedke, L.* (1983): Ingenieurgeologische Arbeiten zur Planung des Endlagers für radioaktive Abfälle im Salzstock Gorleben. Ber. 4. Nat. Tag. Ing.-Geol., S. 195–211.
- Grimmel, E.* (1980): Warum der Salzstock Gorleben-Rambow als Atommüll-Deponie ungeeignet ist. Geowissenschaftliche Aspekte der Endlagerung Radioaktiver Abfälle, Symposium der Deutschen Geologischen Gesellschaft am 19. 11. 1979 in Braunschweig, Z. dt. geol. Ges., **131**, S. 487–519.
- Herrmann, A. G.* (1983): Radioaktive Abfälle – Probleme und Verantwortung. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York.
- Hofrichter, E.* (1980): Probleme der Endlagerung radioaktiver Substanzen in Salzdiapiren. Geowissenschaftliche Aspekte der Endlagerung Radioaktiver Abfälle, Symposium der Deutschen Geologischen Gesellschaft am 19. 11. 1979 in Braunschweig, Z. dt. geol. Ges., **131**, S. 409–430.
- Jaritz, W.; Meyer, K.-D.; Leydecker, G.; Hofrichter, E.* (1980): Stellungnahmen zu den Thesen von *E. Grimmel*. Geowissenschaftliche Aspekte der Endlagerung Radioaktiver Abfälle, Symposium der Deutschen Geologischen Gesellschaft am 19. 11. 1979 in Braunschweig, Z. dt. geol. Ges., **131**, S. 521–558.
- Kreusch, J.; Hirsch, H.* (1984): Sicherheitsprobleme der Endlagerung radioaktiver Abfälle im Salz. Studien und Dokumente, Schriftenreihe der Max-Himmelheber-Stiftung, **9**, Gruppe Ökologie, Hannover.
- Langer M.* (1980): Grundlagen des Standsicherheitsnachweises für ein Endlagerbergwerk im Salzgebirge. Proc. 4. Int. Tagung für Felsmechanik, Aachen.
- Langer, M.; Venzlaff, H.* (1984): Sicherheitsnachweis und Störfallanalyse für ein Endlagerbergwerk im Salzgebirge. Geol. Jb., **A75**, Hannover, S. 351–357.
- Langer, M.; Wallner, M.; Wassmann, H.* (1984): Gebirgsmechanische Bearbeitung von Stabilitätsfragen bei Deponiekavernen im Salzgebirge. Kali und Steinsalz, Band **9**, Heft 2, S. 66–76.
- Milnes, A. G.; Buser, M.; Wildi, W.* (1980): Endlagerkonzepte für radioaktive Abfälle im Überblick. Geowissenschaftliche Aspekte der Endlagerung Radioaktiver Abfälle, Symposium der Deutschen Geologischen Gesellschaft am 19. 11. 1979 in Braunschweig, Z. dt. geol. Ges., **131**, S. 339–340.

### Literatur zu Kapitel 2:

- Albrecht, H.; Meister, D.; Wallner, M.* (1978): Bestimmung geotechnischer Kennwerte von Salzgesteinen. 2. Nat. Tagung über Felsmechanik, Aachen.
- Albrecht, H.; Hunsche, U.* (1980): Gebirgsmechanische Aspekte bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle in Salzdiapiren unter besonderer Berücksichtigung des Fließverhaltens von Steinsalz. Fortschritte der Mineralogie, **58**, Nr. 2, S. 212–247.
- Argon, A. S.* (1970): Internal Stresses Arising from the Interaction of Mobile Dislocations. Scripta Metallurgica, **4**, S. 1001–1004.
- Argyis, J. H.; Faust, G.; Szimmat, J.; Willam, K.* (1978): Finite Elemente zur thermomechanischen Berechnung von Massivbauten. In: *Pahl, P. J.; Stein, E.; Wunderlich, W.*, Finite Elemente in

- der Baupraxis, Tagung an der Technischen Universität Hannover am 13. und 14. April 1978, Verlag von Wilhelm Ernst & Sohn, Berlin – München – Düsseldorf.
- Boresi, A.P.; Deere, D.U.* (1963): Creep Closure of a Spherical Cavity in an Infinite Medium. Report for Holmes and Narver, Inc., Las Vegas.
- Burgers, J.M., et al.* (1935): First Report on Viscosity and Plasticity. Amsterdam, Academy of Science.
- Carter, N.L.; Heard, H.C.* (1970): Temperature and rate dependent deformation of halite. *Am. J. of Science*, **269**, S. 193–249.
- Coghlan, W.A.; Menezes, R.A.; Nix, W.D.* (1971): A Study of High Temperature Creep in LiF Single Crystals. *Philosophical Magazine*, **23**, S. 1515–1530.
- Coleman, B.D.; Noll, W.* (1963): The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, **13**, S. 167.
- Fossum, A.F.* (1977): Visco-plastic behaviour during the excavation phase of a salt cavity. *Int. J. Num. Anal. Meth. Geomech.*, **1**, S. 45–55.
- Gilman, J.J.* (1968): Escape of Dislocations from bound States by Tunneling. *Journal of Applied Physics*, **39**, (13), S. 6086–6090.
- Gupta, I., Li, J.C.M.* (1970): Stress Relaxation, Internal Stress and Work Hardening in LiF and NaCl Crystals. *Materials Science and Engineering*, **6**, S. 20–26.
- Haasen, P.* (1968): Dislocation Dynamics in the Diamond Structure. *Materials Science and Engineering Series, Dislocation Dynamics*, S. 701–722, ed.: A.R. Rosenfield et al.
- Heusermann, S.* (1982): Kritische Gegenüberstellung und Bewertung theoretischer Berechnungsansätze zur Beschreibung des Kriechverhaltens von Steinsalz auf der Grundlage von Laboruntersuchungen und in situ-Messungen. Dissertation, Universität Hannover.
- Kemter, L.; Strunk, H.* (1977): Dislocation Densities in Deformed NaCl Single Crystals Determined by Transmission Electron Microscopy. *physica status solidi (a)*, **40**, S. 385–391.
- Krempf, E.* (1975): On the interaction of rate and history dependence in structural metals. *Acta Mechanica*, **22**, S. 53–90.
- Krempf, E.; Cernocky, E.P.* (1980): A theory of viscoplasticity based on infinitesimal total strain. *Acta Mechanica*, **36**, S. 263–289.
- Kröner, E.* (1973): The rheological behaviour of metals. *Rheol. Acta*, **12**, S. 374–392.
- Langer, M.; Hofrichter, E.* (1969): Standsicherheit und Konvergenz von Salzkavernen. *Proc. Symp. Large Permanent openings*, Oslo.
- Langer, M.* (1978): Grundzüge einer theoretischen Salzmechanik. *Proc. 3. Nat. Tagung für Felsmechanik*, Aachen, S. 167–188.
- Langer, M.; Hunsche, U.; et al.* (1980): Das Verformungs- und Bruchverhalten von Steinsalz. Zusammenfassende Darstellung einiger Forschungsergebnisse der BGR zur Salzmechanik, Hannover, Salzmechanik II.
- Lehmann, Th.* (1979): Coupling phenomena in thermoplasticity. *Proc. of SMIRT-5*, Berlin.
- Leipholz, H.* (1968): Einführung in die Elastizitätstheorie. Wissenschaft + Technik, Taschenausgaben, G. Braun, Karlsruhe.
- Lomenick, T.F.; Bradshaw, R.L.* (1969): Deformation of rock salt in openings mined for the disposal of radioactive wastes. *Rock Mechanics*, **1**, S. 5–30.
- Lux, K.H.; Rokahr, R.B.* (1980): Dimensionierungsgrundlagen im Salzkavernenbau. Taschenbuch für den Tunnelbau, S. 240–318.
- Lux, K.H.* (1983): Gebirgsmechanischer Entwurf und Felderfahrungen im Salzkavernenbau. Habilitation, Universität Hannover.
- Menzel, W.; Schreiner, W.* (1975): Zum geomechanischen Verhalten von Steinsalz verschiedener Lagerstätten der DDR. Teil I: Das Festigkeitsverhalten. *Neue Bergbautechnik*, **5**, S. 669–676.
- Menzel, W.; Schreiner, W.* (1977): Zum geomechanischen Verhalten von Steinsalz verschiedener Lagerstätten der DDR. Teil II: Das Verformungsverhalten. *Neue Bergbautechnik*, **7**, S. 565–574.

- Menzel, W.; Schreiner, W. (1978): Zum geomechanischen Verhalten von Steinsalz verschiedener Lagerstätten der DDR. Teil III: Zum Einfluß erhöhter Temperatur, schwellenden Druckes und radioaktiver Strahlung. *Neue Bergbautechnik*, **8**, S. 143–148.
- Munson, D.E.; Dawson, P.R. (1981): Salt Constitutive Modeling Using Mechanism Maps. 1st Conf. on the Behaviour of Salt, Penn. State University, S. 717–737.
- Nipp, H.-K. (1982): Temperatureinflüsse auf rheologische Spannungszustände im Salzgebirge. Dissertation, Technische Universität Braunschweig.
- Noll, W. (1958/59): A mathematical Theory of the mechanical behaviour of continuous media. *ARMA*, **2**, S. 107–226.
- Peissker, E.; Haasen, P.; Alexander, H. (1962): Anisotropic Plastic Deformation of Antimonide. *Philosophical Magazine Serial 8*, **7**, S. 1279–1303.
- Olschewski, J.; Stein, E.; Wagner, W.; Wetjen, D. (1981): Stoffgleichungen für Steinsalz unter mechanischer und thermischer Beanspruchung. Forschungs- und Seminarberichte aus dem Bereich der Mechanik der Universität Hannover, Bericht-Nr. F 81/2.
- Serata, S. (1968): Application of continuum mechanics to design of deep potash mines in Canada. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.*, **5**, S. 293–314.
- Stein, E. (1984): Unterlagen zur Vorlesung Elastizitätstheorie, SS 1984. Eigenverlag Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover.
- Stein, E.; Wetjen, D. (1984): Thermo-mechanisches Kriechen von Steinsalz. *ZAMM*, **64**.
- Stein, E.; Wetjen, D. (1985): Equations for the Description of Thermo-Mechanical Creep of Rock-salt and Parametric Studies by the aid of Finite-Element-Computations. Proc. 2nd. Conf. on the Mech. Behaviour of Salt, Hannover 1984 (In Vorbereitung).
- Thoms, R.L.; Char, Ch.V.; Bergeron, W.J. (1972): Finite Element analysis of rock-salt pillar models. New horizons in rock mechanics, Proc. 14th Symp. on Rock Mechanics, S. 392–408.
- Valanis, K.C. (1975): On the foundations of the endochronic theory of viscoplasticity, *Arch. Mech.*, **27**, S. 857–868.
- Wallner, M. (1979): Berechnung thermomechanischer Vorgänge bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle im Salzgestein. Proc. 4. Int. Congr. Rock Mech., Montreaux, Band 3.
- Wallner, M.; Caninenberg, C.; Gonther, H. (1979): Ermittlung zeit- und temperaturabhängiger mechanischer Kennwerte von Salzgesteinen. Proc. 4. Int. Congr. Rock Mech., Montreaux, Band 1, S. 313–318.
- Wallner, M. (1981): Berechnung thermomechanischer Vorgänge bei der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle im Salzgestein unter Verwendung eines optimierten Finite-Element-Programmes (ANSALT). Forschungsbericht der Bundesanstalt für Geowissenschaft und Rohstoffe (BGR), Hannover.
- Wallner, M. (1984): Entwicklung eines konsistenten Stoffgesetzes für das mechanische Verhalten von Steinsalz aus Laborversuchen. Storage and Disposal of Radioactive Waste in Geological Formations, Brüssel, April 1983. In: Salzmechanik V, Veröffentlichungen von Mitarbeitern der BGR über Salzmechanik (1983 und 1984), Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover.
- Wawersik, W.R.; Zeuch, D.H. (1984): Creep and creep modeling of three domal salts – a comprehensive update. Sandia National Laboratories, Albuquerque NM, SAND-84-0568, 78 S.
- Weertman, J. (1968): Dislocation climb theory of steady-state creep. *Trans. Am. Soc. Metals*, **61**, S. 681–694.
- Wetjen, D.; Lammering, R.; Kahn, R. (1983): Entwicklung konsistenter Gleichungen für Salze ... Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben KWA 5118-2 des BMFT (unveröffentlicht).
- Wetjen, D.; Heemann, U. (1985): 6. Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben KWA 5202-6 des BMFT (unveröffentlicht).
- Zienkiewicz, O.C. (1984): Methode der finiten Elemente, 2. erw. und völlig neubearb. Aufl. Carl Hanser Verlag, München.

Literatur zu Kapitel 3:

- Bathe, K.-J.* (1982): Finite element procedures in engineering analysis. Prentice-Hall. Ing., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Burden, R. L.; Faires, J. D.; Reynolds, A. C.* (1981): Numerical Analysis. Prindle, Weber & Schmidt, Boston, Massachusetts.
- Butcher, I. C.* (1987): The numerical analysis of ordinary differential equations. Wiley.
- Corneau, F.* (1975): Numerical stability in quasi-static elasto/visco-plasticity. Int. J. Num. Meth. Eng., **9**, S. 109.
- Dennis, J. E.; Moré, J. J.* (1977): Quasi-Newton methods, motivation and theory. SIAM review **19**.
- Gruttmann, F.; Stein, E.* (1987): Tangentiale Steifigkeitsmatrizen bei Anwendung von Projektionsverfahren in der Elastoplastizitätstheorie. Ingenieur-Archiv **57**.
- Lambert, J. D.* (1983): Computational Methods in Ordinary Differential Equations. John Wiley & Sons, Chichester, New York, Brisbane, Toronto.
- Marchuk, G. I.* (1975): Methods of Numerical Mathematics. Springer-Verlag. New York, Heidelberg, Berlin.
- Mathies, H.; Strang, G.* (1979): The solution of nonlinear finite element equations. Int. J. Num. Meth. Eng., **9**, S. 1613–1626.
- Owen, D. R. J.; Hinton, E.* (1980): Finite elements in plasticity: theory and practice. Pineridge Press, Swansea.
- Simo, J. C.; Taylor, R. L.* (1985): Consistent Tangent operators for rate-independent elastoplasticity. Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., **48**, S. 101–108.
- Smith, G. D.* (1984): Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods. Clarendon Press, Oxford.